```
data_new

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)3Mg[SiW10O36(HOOCCH2CH2PO)]2.
((CH3)3NCOH)2
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C162 H290 Mg N12 O86 P6 Si2 W18'
_chemical_formula_weight          7357.67

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Mg'  'Mg'   0.1719   0.1771
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Triclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'P-1'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, -y, -z'

_cell_length_a                    18.599
_cell_length_b                    19.242
_cell_length_c                    20.868
_cell_angle_alpha                 94.19
_cell_angle_beta                  116.05
_cell_angle_gamma                 114.98
_cell_volume                      5767.8
_cell_formula_units_Z             1
_cell_measurement_temperature     200(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       2.5
_cell_measurement_theta_max       65.9

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.10
_exptl_crystal_size_mid           0.10
_exptl_crystal_size_min           0.10
_exptl_crystal_density_meas       ?
```

```
_exptl_crystal_density_diffrn     2.118
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              3496
_exptl_absorpt_coefficient_mu     17.289
_exptl_absorpt_correction_type    multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min   0.2767
_exptl_absorpt_correction_T_max   0.2767
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       200(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             37161
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0562
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0715
_diffrn_reflns_limit_h_min        -21
_diffrn_reflns_limit_h_max        20
_diffrn_reflns_limit_k_min        -22
_diffrn_reflns_limit_k_max        22
_diffrn_reflns_limit_l_min        -24
_diffrn_reflns_limit_l_max        24
_diffrn_reflns_theta_min          2.49
_diffrn_reflns_theta_max          65.89
_reflns_number_total              17620
_reflns_number_gt                 14317
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
```

```
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0393P)^2^+20.4947P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          17620
_refine_ls_number_parameters      1212
_refine_ls_number_restraints      503
_refine_ls_R_factor_all           0.0588
_refine_ls_R_factor_gt            0.0436
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1120
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1039
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.053
_refine_ls_restrained_S_all       1.046
_refine_ls_shift/su_max           0.067
_refine_ls_shift/su_mean          0.004

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.9865(6) 0.3734(5) 0.6677(5) 0.0253(18) Uani 1 1 d U . .
C2 C 0.9741(7) 0.3229(6) 0.7101(6) 0.038(2) Uani 1 1 d U . .
H2 H 0.9179 0.2725 0.6882 0.045 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 1.0685(6) 0.4463(5) 0.6991(5) 0.0276(19) Uani 1 1 d U . .
H3 H 1.0778 0.4808 0.6696 0.033 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 1.0424(7) 0.3446(6) 0.7843(6) 0.042(3) Uani 1 1 d U . .
H4 H 1.0331 0.3095 0.8132 0.051 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 1.1371(7) 0.4693(6) 0.7734(5) 0.035(2) Uani 1 1 d U . .
H5 H 1.1928 0.5201 0.7951 0.042 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 1.1253(7) 0.4188(6) 0.8162(5) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
C7 C 1.2007(7) 0.4425(6) 0.8962(6) 0.038(2) Uani 1 1 d U . .
C8 C 1.2919(8) 0.5162(8) 0.9266(7) 0.062(4) Uani 1 1 d U . .
H8A H 1.3333 0.5231 0.9791 0.093 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 1.2839 0.5632 0.9241 0.093 Uiso 1 1 calc R . .
H8C H 1.3191 0.5110 0.8968 0.093 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.8496(6) 0.6328(5) 0.4523(5) 0.0267(19) Uani 1 1 d U . .
C10 C 0.7900(8) 0.6626(6) 0.4448(8) 0.049(3) Uani 1 1 d U . .
H10 H 0.7253 0.6265 0.4222 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.9445(6) 0.6872(5) 0.4853(5) 0.027(2) Uani 1 1 d U . .
H11 H 0.9852 0.6678 0.4899 0.033 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.8269(8) 0.7448(6) 0.4707(8) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
H12 H 0.7866 0.7649 0.4655 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.9792(7) 0.7690(5) 0.5111(6) 0.031(2) Uani 1 1 d U . .
H13 H 1.0440 0.8053 0.5342 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.9212(7) 0.7993(6) 0.5040(7) 0.039(2) Uani 1 1 d U . .
C15 C 0.9564(9) 0.8874(6) 0.5307(8) 0.052(3) Uani 1 1 d U . .
C16 C 1.0589(9) 0.9454(6) 0.5662(8) 0.060(3) Uani 1 1 d U . .
H16A H 1.0721 1.0009 0.5810 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 1.0776 0.9395 0.5299 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H 1.0937 0.9336 0.6107 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
```

C17 C 1.0295(6) 0.3884(5) 0.3280(5) 0.0252(18) Uani 1 1 d U . .
C18 C 1.0293(7) 0.3387(6) 0.2772(6) 0.043(3) Uani 1 1 d U . .
H18 H 0.9758 0.2870 0.2464 0.052 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 1.1100(7) 0.4616(5) 0.3756(6) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
H19 H 1.1115 0.4952 0.4124 0.039 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 1.1063(8) 0.3634(6) 0.2705(7) 0.048(3) Uani 1 1 d U . .
H20 H 1.1042 0.3293 0.2336 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 1.1871(7) 0.4863(6) 0.3705(6) 0.034(2) Uani 1 1 d U . .
H21 H 1.2413 0.5370 0.4034 0.040 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 1.1878(7) 0.4383(6) 0.3176(6) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
C23 C 1.2683(8) 0.4655(7) 0.3088(7) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
C24 C 1.3587(8) 0.5371(7) 0.3666(7) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
H24A H 1.4047 0.5469 0.3520 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 1.3797 0.5272 0.4152 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 1.3515 0.5845 0.3707 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.6340(6) 0.8764(5) 0.4659(5) 0.0343(17) Uani 1 1 d DU . .
C25 C 0.5908(7) 0.8046(5) 0.4912(7) 0.038(2) Uani 1 1 d U . .
H25A H 0.5980 0.8263 0.5395 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.5234 0.7718 0.4537 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.6303(8) 0.7498(6) 0.5014(7) 0.046(3) Uani 1 1 d U . .
H26A H 0.6987 0.7819 0.5342 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.6146 0.7200 0.4521 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.5897(8) 0.6904(6) 0.5370(7) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
H27A H 0.5211 0.6623 0.5062 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.6095 0.7206 0.5877 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.6207(11) 0.6273(8) 0.5437(10) 0.071(4) Uani 1 1 d U . .
H28A H 0.5934 0.5906 0.5671 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.6885 0.6549 0.5747 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.5998 0.5963 0.4935 0.106 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.7377(7) 0.9300(6) 0.5234(6) 0.038(2) Uani 1 1 d U . .
H29A H 0.7679 0.8975 0.5268 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.7643 0.9742 0.5048 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.7613(9) 0.9663(10) 0.6000(8) 0.072(4) Uani 1 1 d DU . .
H30A H 0.7379 0.9233 0.6209 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.7323 0.9996 0.5982 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.8706(11) 1.0207(14) 0.6509(9) 0.116(8) Uani 1 1 d DU . .
H31A H 0.8971 0.9857 0.6674 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.8951 1.0479 0.6207 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.9009(18) 1.0821(16) 0.7174(13) 0.168(10) Uani 1 1 d DU . .
H32A H 0.9689 1.1140 0.7469 0.252 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.8781 1.0555 0.7482 0.252 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.8761 1.1177 0.7015 0.252 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.5857(7) 0.9250(6) 0.4583(6) 0.038(2) Uani 1 1 d U . .
H33A H 0.6235 0.9777 0.4550 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.5842 0.9359 0.5046 0.046 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.4868(8) 0.8853(6) 0.3909(7) 0.041(2) Uani 1 1 d U . .
H34A H 0.4883 0.8852 0.3440 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.4510 0.8285 0.3878 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.4401(9) 0.9306(7) 0.3982(8) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
H35A H 0.4792 0.9882 0.4053 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.4359 0.9278 0.4438 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.3440(10) 0.8984(9) 0.3312(9) 0.073(4) Uani 1 1 d U . .
H36A H 0.3177 0.9304 0.3395 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.3043 0.8418 0.3246 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H 0.3476 0.9021 0.2860 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.6241(8) 0.8433(6) 0.3920(7) 0.042(2) Uani 1 1 d U . .
C38 C 0.6598(9) 0.9071(8) 0.3571(8) 0.055(3) Uani 1 1 d U . .
H38A H 0.6271 0.9380 0.3475 0.066 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.7272 0.9453 0.3911 0.066 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.6403(14) 0.8608(12) 0.2836(10) 0.103(6) Uani 1 1 d DU . .
H39A H 0.6659 0.8244 0.2945 0.123 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.5721 0.8263 0.2499 0.123 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.6775(19) 0.9096(14) 0.2420(13) 0.141(9) Uani 1 1 d DU . .
H40A H 0.6340 0.8825 0.1878 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.7376 0.9152 0.2555 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.6853 0.9633 0.2554 0.211 Uiso 1 1 calc R . .

N2 N 0.7027(6) 0.6917(5) 0.9124(5) 0.0435(19) Uani 1 1 d U . .
C41 C 0.6851(8) 0.6075(7) 0.8878(7) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
H41A H 0.7311 0.6110 0.8744 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.6961 0.5867 0.9312 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.5894(9) 0.5470(7) 0.8223(7) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
H42A H 0.5794 0.5650 0.7774 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.5426 0.5451 0.8339 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.5754(10) 0.4623(7) 0.8044(9) 0.067(4) Uani 1 1 d U . .
H43A H 0.5838 0.4439 0.8489 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.6235 0.4647 0.7944 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.4790(13) 0.4003(11) 0.7363(11) 0.113(7) Uani 1 1 d U . .
H44A H 0.4738 0.3472 0.7276 0.169 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.4708 0.4173 0.6916 0.169 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 0.4309 0.3969 0.7462 0.169 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.6911(8) 0.7277(7) 0.8511(7) 0.050(3) Uani 1 1 d U . .
H45A H 0.6953 0.7796 0.8675 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 0.6278 0.6913 0.8071 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.7598(10) 0.7435(9) 0.8259(8) 0.064(3) Uani 1 1 d U . .
H46A H 0.8235 0.7799 0.8694 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.7551 0.6918 0.8079 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
C47 C 0.7431(12) 0.7808(11) 0.7648(9) 0.079(4) Uani 1 1 d U . .
H47A H 0.7432 0.8303 0.7817 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.6808 0.7427 0.7203 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.8142(12) 0.8028(11) 0.7416(10) 0.085(5) Uani 1 1 d U . .
H48A H 0.7992 0.8269 0.7014 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.8137 0.7540 0.7236 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
H48C H 0.8760 0.8417 0.7850 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.8022(8) 0.7428(7) 0.9803(7) 0.050(3) Uani 1 1 d U . .
H49A H 0.8068 0.7184 1.0211 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
H49B H 0.8448 0.7393 0.9657 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
C50 C 0.8353(9) 0.8299(8) 1.0109(8) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
H50A H 0.8001 0.8349 1.0335 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.8239 0.8537 0.9695 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
C51 C 0.9390(10) 0.8761(8) 1.0704(10) 0.082(5) Uani 1 1 d DU . .
H51A H 0.9730 0.8642 1.0499 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H51B H 0.9490 0.8574 1.1149 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
C52 C 0.9790(12) 0.9689(9) 1.0952(12) 0.115(8) Uani 1 1 d DU . .
H52A H 1.0453 0.9962 1.1334 0.173 Uiso 1 1 calc R . .
H52B H 0.9462 0.9811 1.1163 0.173 Uiso 1 1 calc R . .
H52C H 0.9706 0.9880 1.0515 0.173 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C 0.6352(8) 0.6899(8) 0.9357(7) 0.048(2) Uani 1 1 d U . .
H53A H 0.6522 0.7464 0.9554 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H 0.5723 0.6626 0.8901 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.6298(10) 0.6493(10) 0.9934(8) 0.065(3) Uani 1 1 d U . .
H54A H 0.6928 0.6724 1.0382 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.6046 0.5908 0.9725 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 0.5674(11) 0.6611(11) 1.0164(9) 0.086(5) Uani 1 1 d DU . .
H55A H 0.5921 0.7198 1.0353 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 0.5047 0.6373 0.9712 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
C56 C 0.5587(16) 0.6242(15) 1.0758(12) 0.141(9) Uani 1 1 d DU . .
H56A H 0.5174 0.6342 1.0871 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H56B H 0.6201 0.6485 1.1216 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H56C H 0.5328 0.5658 1.0573 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
N3 N 0.7650(7) 0.1178(6) 0.0269(6) 0.054(2) Uani 1 1 d U . .
C57 C 0.7580(9) 0.0624(7) 0.0748(8) 0.060(3) Uani 1 1 d U . .
H57A H 0.7218 0.0056 0.0420 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
H57B H 0.7236 0.0688 0.0978 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
C58 C 0.8561(10) 0.0798(8) 0.1395(8) 0.064(3) Uani 1 1 d U . .
H58A H 0.8968 0.0858 0.1193 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
H58B H 0.8865 0.1305 0.1801 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
C59 C 0.8401(13) 0.0088(10) 0.1702(10) 0.085(4) Uani 1 1 d U . .
H59A H 0.8216 -0.0395 0.1327 0.102 Uiso 1 1 calc R . .
H59B H 0.7897 -0.0043 0.1807 0.102 Uiso 1 1 calc R . .
C60 C 0.9320(15) 0.0323(16) 0.2440(11) 0.125(8) Uani 1 1 d U . .
H60A H 0.9229 -0.0131 0.2643 0.187 Uiso 1 1 calc R . .
H60B H 0.9494 0.0796 0.2811 0.187 Uiso 1 1 calc R . .

H60C H 0.9815 0.0450 0.2332 0.187 Uiso 1 1 calc R . .
C61 C 0.8218(10) 0.2050(7) 0.0764(7) 0.063(3) Uani 1 1 d U . .
H61A H 0.7996 0.2097 0.1109 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
H61B H 0.8872 0.2188 0.1077 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
C62 C 0.8194(11) 0.2661(8) 0.0360(8) 0.067(4) Uani 1 1 d U . .
H62A H 0.7555 0.2570 0.0089 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H62B H 0.8369 0.2595 -0.0015 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
C63 C 0.8859(11) 0.3517(8) 0.0913(10) 0.078(4) Uani 1 1 d U . .
H63A H 0.8706 0.3564 0.1306 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H63B H 0.9499 0.3610 0.1162 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C64 C 0.8833(17) 0.4159(10) 0.0556(15) 0.129(8) Uani 1 1 d U . .
H64A H 0.9278 0.4691 0.0941 0.194 Uiso 1 1 calc R . .
H64B H 0.8207 0.4082 0.0321 0.194 Uiso 1 1 calc R . .
H64C H 0.8997 0.4124 0.0173 0.194 Uiso 1 1 calc R . .
C65 C 0.6674(9) 0.0957(8) -0.0311(7) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
H65A H 0.6325 0.0377 -0.0602 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
H65B H 0.6708 0.1268 -0.0664 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
C66 C 0.6123(9) 0.1107(8) -0.0003(8) 0.065(4) Uani 1 1 d U . .
H66A H 0.6460 0.1685 0.0289 0.078 Uiso 1 1 calc R . .
H66B H 0.6059 0.0784 0.0336 0.078 Uiso 1 1 calc R . .
C67 C 0.5152(10) 0.0869(10) -0.0659(9) 0.078(4) Uani 1 1 d U . .
H67A H 0.5216 0.1141 -0.1031 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H67B H 0.4788 0.0278 -0.0913 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C68 C 0.4652(12) 0.1107(13) -0.0373(10) 0.110(7) Uani 1 1 d U . .
H68A H 0.4037 0.0952 -0.0794 0.165 Uiso 1 1 calc R . .
H68B H 0.5008 0.1693 -0.0128 0.165 Uiso 1 1 calc R . .
H68C H 0.4582 0.0832 -0.0009 0.165 Uiso 1 1 calc R . .
C69 C 0.8090(9) 0.1051(8) -0.0165(8) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
H69A H 0.8038 0.1371 -0.0516 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
H69B H 0.8760 0.1280 0.0199 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
C70 C 0.7712(10) 0.0214(8) -0.0601(10) 0.079(5) Uani 1 1 d U . .
H70A H 0.7038 -0.0026 -0.0961 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H70B H 0.7786 -0.0107 -0.0252 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C71 C 0.8159(11) 0.0149(9) -0.1026(9) 0.083(4) Uani 1 1 d DU . .
H71A H 0.7938 -0.0427 -0.1239 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
H71B H 0.8840 0.0431 -0.0677 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
C72 C 0.7941(13) 0.0515(12) -0.1656(10) 0.109(6) Uani 1 1 d DU . .
H72A H 0.8239 0.0456 -0.1928 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
H72B H 0.8177 0.1090 -0.1445 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
H72C H 0.7268 0.0236 -0.2003 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
N1S N 0.9411(10) 0.6379(9) 0.9659(8) 0.092(4) Uiso 1 1 d DU . .
C10S C 0.8849(17) 0.5538(12) 0.9450(14) 0.145(9) Uiso 1 1 d DU . .
H10A H 0.9014 0.5366 0.9900 0.217 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.8946 0.5270 0.9104 0.217 Uiso 1 1 calc R . .
H10C H 0.8196 0.5389 0.9202 0.217 Uiso 1 1 calc R . .
C11S C 1.0042(17) 0.6835(15) 1.0483(13) 0.152(9) Uiso 1 1 d DU . .
H11A H 1.0012 0.6453 1.0769 0.227 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.9847 0.7192 1.0622 0.227 Uiso 1 1 calc R . .
H11C H 1.0680 0.7160 1.0597 0.227 Uiso 1 1 calc R . .
C12S C 0.9351(11) 0.6786(9) 0.9180(9) 0.075(4) Uiso 1 1 d DU . .
H12S H 0.8909 0.6473 0.8666 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
O1S O 0.9771(10) 0.7487(8) 0.9302(8) 0.111(4) Uiso 1 1 d DU . .
N2S N 0.8332(17) 0.7489(14) 0.2587(13) 0.166(8) Uiso 1 1 d DU . .
C20S C 0.8063(19) 0.6794(15) 0.2804(15) 0.153(10) Uiso 1 1 d DU . .
H20A H 0.8233 0.6949 0.3330 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.8379 0.6515 0.2752 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.7390 0.6433 0.2483 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
C21S C 0.878(5) 0.825(2) 0.322(3) 0.52(5) Uiso 1 1 d DU . .
H21A H 0.8792 0.8102 0.3665 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.8422 0.8522 0.3064 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
H21C H 0.9417 0.8610 0.3347 0.777 Uiso 1 1 calc R . .
C22S C 0.8199(16) 0.7517(14) 0.1921(13) 0.119(7) Uiso 1 1 d DU . .
H22S H 0.7974 0.7010 0.1592 0.142 Uiso 1 1 calc R . .
O2S O 0.830(2) 0.8018(17) 0.1651(16) 0.258(12) Uiso 1 1 d DU . .
N3S N 0.210(3) 0.649(4) 0.198(3) 0.43(3) Uiso 1 1 d DU . .
C30S C 0.161(2) 0.604(2) 0.2309(19) 0.208(15) Uiso 1 1 d DU . .

```
H30C H 0.1006 0.6009 0.2091 0.312 Uiso 1 1 calc R . .
H30D H 0.1971 0.6313 0.2853 0.312 Uiso 1 1 calc R . .
H30E H 0.1517 0.5495 0.2211 0.312 Uiso 1 1 calc R . .
C31S C 0.145(4) 0.671(4) 0.139(3) 0.400 Uiso 1 1 d DU . .
H31C H 0.0874 0.6517 0.1396 0.600 Uiso 1 1 calc R . .
H31D H 0.1299 0.6462 0.0886 0.600 Uiso 1 1 calc R . .
H31E H 0.1758 0.7301 0.1503 0.600 Uiso 1 1 calc R . .
C32S C 0.289(3) 0.669(4) 0.202(3) 0.373 Uiso 1 1 d DU . .
H32S H 0.3235 0.6489 0.2349 0.448 Uiso 1 1 calc R . .
O3S O 0.329(3) 0.710(4) 0.172(3) 0.50(3) Uiso 1 1 d DU . .
O1 O 0.3652(5) 0.1335(4) 0.3269(4) 0.0383(16) Uani 1 1 d U . .
O2 O 0.4118(4) 0.1633(3) 0.2166(4) 0.0290(13) Uani 1 1 d U . .
O3 O 0.3984(4) 0.1524(4) 0.0791(4) 0.0336(14) Uani 1 1 d U . .
O4 O 0.4751(4) 0.0772(3) 0.1734(4) 0.0301(13) Uani 1 1 d U . .
O5 O 0.4926(5) -0.0390(4) 0.2370(4) 0.0389(16) Uani 1 1 d U . .
O6 O 0.4589(4) 0.0688(3) 0.2947(3) 0.0294(13) Uani 1 1 d U . .
O7 O 0.5785(4) 0.1967(3) 0.2929(3) 0.0235(11) Uani 1 1 d U . .
O8 O 0.5557(4) 0.1946(3) 0.4229(4) 0.0280(13) Uani 1 1 d U . .
O9 O 0.5107(4) 0.2838(4) 0.3473(3) 0.0272(13) Uani 1 1 d U . .
O10 O 0.5324(4) 0.2947(4) 0.2016(3) 0.0279(13) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.5905(4) 0.2121(3) 0.1595(3) 0.0282(13) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.6464(4) 0.0983(3) 0.2543(3) 0.0270(13) Uani 1 1 d U . .
O13 O 0.6314(4) 0.0907(3) 0.3709(4) 0.0286(13) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.7239(4) 0.2603(3) 0.4273(3) 0.0213(11) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.6766(4) 0.3532(3) 0.3473(3) 0.0219(11) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.7395(4) 0.2672(3) 0.3045(3) 0.0209(11) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.6502(5) 0.2686(4) 0.5765(4) 0.0357(15) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.6651(4) 0.3527(3) 0.4768(3) 0.0252(12) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.5657(5) 0.4323(4) 0.4343(4) 0.0363(15) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.5783(4) 0.4178(3) 0.3080(4) 0.0283(13) Uani 1 1 d U . .
O21 O 0.6001(4) 0.4473(4) 0.1881(4) 0.0319(14) Uani 1 1 d U . .
O22 O 0.7024(4) 0.3700(3) 0.2273(3) 0.0228(12) Uani 1 1 d U . .
O23 O 0.7095(4) 0.2969(4) 0.1133(3) 0.0312(14) Uani 1 1 d U . .
O24 O 0.7406(4) 0.1959(3) 0.1977(3) 0.0266(13) Uani 1 1 d U . .
O25 O 0.8058(5) 0.1040(4) 0.2736(4) 0.0379(16) Uani 1 1 d U . .
O26 O 0.7973(4) 0.1749(3) 0.3891(3) 0.0258(12) Uani 1 1 d U . .
O27 O 0.7804(4) 0.0944(3) 0.4898(4) 0.0341(15) Uani 1 1 d U . .
O28 O 0.7013(4) 0.1784(3) 0.5131(3) 0.0277(13) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.8130(4) 0.3389(3) 0.5752(3) 0.0257(13) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.7328(4) 0.4903(3) 0.4440(3) 0.0252(13) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.7481(4) 0.5018(3) 0.3314(3) 0.0238(12) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.8547(4) 0.3558(3) 0.2595(3) 0.0230(12) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.8961(4) 0.2692(3) 0.3335(3) 0.0259(13) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.8716(4) 0.2592(3) 0.5345(3) 0.0272(13) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.9324(4) 0.4067(3) 0.5365(3) 0.0252(13) Uani 1 1 d U . .
O36 O 0.8800(4) 0.5081(3) 0.4485(4) 0.0283(13) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.9494(4) 0.4132(3) 0.4012(3) 0.0252(13) Uani 1 1 d U . .
O38 O 1.1849(6) 0.4001(5) 0.9351(4) 0.062(2) Uani 1 1 d U . .
O39 O 0.9037(7) 0.9127(5) 0.5237(7) 0.079(3) Uani 1 1 d U . .
O40 O 1.2617(6) 0.4290(6) 0.2532(5) 0.071(3) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si 0.68604(15) 0.27379(12) 0.34614(12) 0.0161(5) Uani 1 1 d U . .
P1 P 0.89759(15) 0.34631(12) 0.57091(13) 0.0232(5) Uani 1 1 d U . .
P2 P 0.80508(16) 0.52673(12) 0.41919(13) 0.0234(5) Uani 1 1 d U . .
P3 P 0.92835(16) 0.35799(13) 0.33499(13) 0.0240(5) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.46322(3) 0.16886(2) 0.32059(2) 0.02562(11) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.48325(3) 0.18003(2) 0.16959(2) 0.02545(11) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.54104(3) 0.06234(2) 0.26662(2) 0.02656(11) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.67616(3) 0.26565(2) 0.50772(2) 0.02443(10) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.60992(3) 0.39088(2) 0.39863(2) 0.02396(10) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.63291(3) 0.40206(2) 0.25374(2) 0.02305(10) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.71635(3) 0.28398(2) 0.19540(2) 0.02411(10) Uani 1 1 d U . .
W8 W 0.77256(3) 0.17035(2) 0.29003(2) 0.02565(11) Uani 1 1 d U . .
W9 W 0.75209(3) 0.16223(2) 0.45568(2) 0.02518(11) Uani 1 1 d U . .
NA1 Mg 1.0000 0.5000 0.5000 0.0069(6) Uiso 1 2 d SU . .

loop_
```

_atom_site_aniso_label	_atom_site_aniso_U_11	_atom_site_aniso_U_22	_atom_site_aniso_U_33	_atom_site_aniso_U_23	_atom_site_aniso_U_13	_atom_site_aniso_U_12
C1	0.026(4)	0.021(4)	0.025(4)	0.007(3)	0.011(3)	0.012(3)
C2	0.031(5)	0.025(4)	0.029(5)	0.010(4)	0.007(4)	0.001(4)
C3	0.022(4)	0.027(4)	0.026(4)	0.012(4)	0.005(3)	0.013(4)
C4	0.037(6)	0.039(5)	0.035(5)	0.020(4)	0.013(4)	0.011(4)
C5	0.031(5)	0.025(4)	0.022(4)	0.007(4)	0.002(4)	0.005(4)
C6	0.025(5)	0.037(5)	0.022(4)	0.010(4)	0.004(3)	0.014(4)
C7	0.032(5)	0.043(5)	0.026(5)	0.014(4)	0.004(4)	0.020(4)
C8	0.033(6)	0.069(8)	0.030(6)	0.011(6)	-0.004(5)	0.006(5)
C9	0.023(4)	0.022(3)	0.029(5)	0.005(3)	0.011(4)	0.008(3)
C10	0.023(5)	0.023(4)	0.095(9)	0.012(5)	0.035(6)	0.005(4)
C11	0.018(4)	0.020(4)	0.035(5)	0.004(4)	0.010(4)	0.007(3)
C12	0.041(5)	0.031(4)	0.093(10)	0.009(6)	0.040(6)	0.018(4)
C13	0.020(5)	0.017(4)	0.039(6)	0.004(4)	0.007(4)	0.005(4)
C14	0.035(5)	0.028(4)	0.058(7)	0.011(5)	0.025(5)	0.018(4)
C15	0.059(6)	0.026(4)	0.077(9)	0.016(5)	0.037(7)	0.024(4)
C16	0.061(6)	0.017(4)	0.081(9)	0.013(5)	0.027(7)	0.014(5)
C17	0.020(4)	0.030(4)	0.024(5)	0.007(4)	0.011(3)	0.013(3)
C18	0.024(5)	0.035(5)	0.046(6)	-0.013(5)	0.014(5)	0.004(4)
C19	0.032(5)	0.022(4)	0.043(6)	0.007(4)	0.021(4)	0.011(4)
C20	0.040(6)	0.038(5)	0.057(7)	-0.010(5)	0.029(5)	0.013(4)
C21	0.026(5)	0.026(4)	0.033(5)	0.001(4)	0.013(4)	0.005(4)
C22	0.025(4)	0.036(5)	0.032(5)	0.009(4)	0.012(4)	0.015(4)
C23	0.032(5)	0.048(6)	0.050(6)	0.005(5)	0.021(5)	0.017(5)
C24	0.028(5)	0.055(7)	0.054(7)	0.001(5)	0.021(5)	0.005(5)
N1	0.032(4)	0.028(4)	0.050(5)	0.020(4)	0.025(4)	0.017(4)
C25	0.034(6)	0.021(4)	0.062(7)	0.016(4)	0.029(5)	0.010(4)
C26	0.048(7)	0.031(5)	0.068(8)	0.027(5)	0.032(6)	0.022(5)
C27	0.050(7)	0.033(5)	0.057(7)	0.022(5)	0.028(6)	0.022(5)
C28	0.078(10)	0.048(7)	0.120(13)	0.053(8)	0.063(10)	0.042(7)
C29	0.024(4)	0.031(5)	0.059(6)	0.018(4)	0.023(4)	0.011(4)
C30	0.042(6)	0.107(11)	0.061(7)	0.022(7)	0.025(5)	0.038(7)
C31	0.052(8)	0.17(2)	0.067(10)	-0.009(10)	-0.009(7)	0.062(11)
C32	0.129(14)	0.171(16)	0.133(14)	-0.017(10)	0.051(11)	0.048(12)
C33	0.037(5)	0.031(5)	0.055(7)	0.017(5)	0.028(5)	0.020(5)
C34	0.040(5)	0.037(5)	0.058(7)	0.021(5)	0.029(5)	0.023(5)
C35	0.052(7)	0.054(7)	0.071(8)	0.029(6)	0.035(6)	0.036(6)
C36	0.055(8)	0.080(10)	0.096(11)	0.032(8)	0.034(7)	0.047(8)
C37	0.048(7)	0.033(5)	0.049(6)	0.015(4)	0.028(5)	0.021(5)
C38	0.057(8)	0.064(7)	0.067(7)	0.040(6)	0.042(7)	0.037(7)
C39	0.117(13)	0.128(14)	0.068(9)	0.033(9)	0.062(10)	0.052(12)
C40	0.22(3)	0.138(18)	0.112(16)	0.066(14)	0.116(17)	0.090(18)
N2	0.031(5)	0.048(4)	0.044(5)	0.017(4)	0.009(4)	0.024(4)
C41	0.043(6)	0.046(5)	0.052(7)	0.020(4)	0.027(5)	0.023(5)
C42	0.051(7)	0.056(6)	0.050(7)	0.011(5)	0.018(5)	0.030(5)
C43	0.071(9)	0.046(6)	0.079(10)	0.009(6)	0.043(7)	0.023(6)
C44	0.097(12)	0.076(10)	0.091(13)	-0.005(9)	0.036(9)	0.004(9)
C45	0.048(7)	0.050(6)	0.046(6)	0.016(5)	0.017(5)	0.027(6)
C46	0.074(9)	0.077(9)	0.064(8)	0.034(7)	0.040(7)	0.050(8)
C47	0.095(11)	0.113(12)	0.071(10)	0.052(9)	0.052(9)	0.073(11)
C48	0.090(12)	0.121(14)	0.084(11)	0.059(10)	0.057(9)	0.070(11)
C49	0.037(5)	0.058(6)	0.045(6)	0.010(5)	0.010(4)	0.029(5)
C50	0.049(7)	0.055(6)	0.061(8)	0.006(6)	0.019(6)	0.025(5)
C51	0.043(7)	0.072(7)	0.091(11)	-0.003(8)	0.028(7)	0.011(7)
C52	0.064(10)	0.080(7)	0.149(18)	-0.040(11)	0.045(11)	0.017(7)
C53	0.042(6)	0.060(7)	0.041(6)	0.014(5)	0.014(5)	0.032(6)
C54	0.053(8)	0.094(10)	0.049(7)	0.031(7)	0.021(6)	0.043(8)
C55	0.067(10)	0.118(13)	0.071(10)	0.017(9)	0.044(8)	0.039(10)
C56	0.122(14)	0.177(17)	0.128(13)	0.058(11)	0.095(12)	0.047(11)
N3	0.049(5)	0.041(4)	0.055(6)	0.000(4)	0.029(4)	0.011(4)

C57 0.055(7) 0.046(6) 0.062(7) 0.003(5) 0.033(5) 0.011(6)
C58 0.066(8) 0.064(7) 0.064(8) 0.009(6) 0.037(6) 0.032(7)
C59 0.106(12) 0.077(9) 0.091(11) 0.025(8) 0.055(8) 0.058(10)
C60 0.145(17) 0.20(2) 0.096(13) 0.067(14) 0.065(11) 0.129(19)
C61 0.061(8) 0.048(5) 0.051(8) -0.002(5) 0.021(6) 0.015(6)
C62 0.082(10) 0.058(6) 0.072(9) 0.015(6) 0.045(8) 0.039(7)
C63 0.067(10) 0.062(6) 0.109(12) 0.012(7) 0.056(9) 0.026(7)
C64 0.17(2) 0.062(9) 0.21(2) 0.053(12) 0.13(2) 0.056(12)
C65 0.048(6) 0.062(7) 0.053(7) -0.007(6) 0.024(5) 0.018(6)
C66 0.052(7) 0.062(8) 0.054(8) -0.007(7) 0.029(5) 0.010(7)
C67 0.063(8) 0.088(10) 0.080(10) 0.013(9) 0.034(7) 0.041(9)
C68 0.073(11) 0.153(18) 0.088(13) -0.004(12) 0.046(9) 0.047(12)
C69 0.053(7) 0.054(6) 0.066(8) 0.002(6) 0.034(6) 0.019(6)
C70 0.059(9) 0.052(7) 0.100(11) -0.014(7) 0.049(8) 0.006(7)
C71 0.059(9) 0.078(10) 0.079(10) -0.017(7) 0.037(8) 0.014(8)
C72 0.093(13) 0.129(17) 0.087(12) 0.013(10) 0.049(11) 0.045(12)
O1 0.029(3) 0.034(3) 0.037(4) 0.007(3) 0.017(3) 0.005(3)
O2 0.027(3) 0.021(3) 0.029(3) 0.005(2) 0.010(2) 0.010(3)
O3 0.029(3) 0.031(3) 0.029(3) 0.006(3) 0.011(3) 0.011(3)
O4 0.024(3) 0.020(3) 0.029(3) 0.000(2) 0.009(3) 0.003(3)
O5 0.034(4) 0.025(3) 0.034(4) 0.005(3) 0.009(3) 0.006(3)
O6 0.030(3) 0.021(3) 0.024(3) 0.003(2) 0.010(3) 0.007(3)
O7 0.020(3) 0.014(2) 0.023(3) 0.002(2) 0.006(2) 0.003(2)
O8 0.029(3) 0.020(3) 0.030(3) 0.008(2) 0.016(2) 0.008(3)
O9 0.020(3) 0.027(3) 0.029(3) 0.008(2) 0.010(3) 0.010(2)
O10 0.025(3) 0.027(3) 0.027(3) 0.011(2) 0.009(3) 0.014(2)
O11 0.026(3) 0.020(3) 0.025(3) 0.000(3) 0.010(2) 0.005(2)
O12 0.031(3) 0.015(2) 0.026(3) 0.003(2) 0.013(3) 0.007(2)
O13 0.030(3) 0.012(2) 0.032(3) 0.006(2) 0.014(2) 0.003(2)
O14 0.018(3) 0.015(2) 0.024(3) 0.005(2) 0.010(2) 0.004(2)
O15 0.021(3) 0.019(3) 0.027(3) 0.007(2) 0.014(2) 0.010(2)
O16 0.018(3) 0.018(2) 0.022(3) 0.004(2) 0.009(2) 0.006(2)
O17 0.027(4) 0.028(3) 0.040(4) 0.007(3) 0.019(3) 0.004(3)
O18 0.023(3) 0.018(3) 0.022(3) 0.001(2) 0.009(2) 0.004(2)
O19 0.033(4) 0.024(3) 0.042(4) 0.000(3) 0.020(3) 0.008(3)
O20 0.022(3) 0.023(3) 0.032(3) 0.010(3) 0.009(3) 0.011(3)
O21 0.025(3) 0.032(3) 0.032(3) 0.015(3) 0.009(3) 0.015(3)
O22 0.019(3) 0.023(3) 0.017(3) 0.005(2) 0.006(2) 0.007(2)
O23 0.032(4) 0.035(3) 0.024(3) 0.010(3) 0.012(3) 0.016(3)
O24 0.027(3) 0.024(3) 0.019(3) 0.001(2) 0.008(2) 0.010(3)
O25 0.046(4) 0.025(3) 0.044(4) 0.004(3) 0.023(3) 0.019(3)
O26 0.020(3) 0.017(3) 0.032(3) 0.010(2) 0.010(2) 0.006(2)
O27 0.030(4) 0.019(3) 0.038(4) 0.012(3) 0.011(3) 0.007(3)
O28 0.024(3) 0.017(3) 0.026(3) 0.008(2) 0.007(3) 0.004(2)
O29 0.027(3) 0.016(3) 0.023(3) 0.002(2) 0.009(2) 0.005(2)
O30 0.032(3) 0.019(3) 0.026(3) 0.009(2) 0.017(3) 0.012(2)
O31 0.024(3) 0.018(2) 0.028(3) 0.011(2) 0.014(2) 0.008(2)
O32 0.018(3) 0.022(3) 0.025(3) 0.005(2) 0.010(2) 0.008(2)
O33 0.025(3) 0.021(3) 0.026(3) 0.005(2) 0.012(3) 0.010(2)
O34 0.027(3) 0.021(3) 0.028(3) 0.008(2) 0.012(2) 0.010(2)
O35 0.028(3) 0.014(3) 0.026(3) 0.005(2) 0.011(3) 0.008(3)
O36 0.028(3) 0.019(3) 0.031(3) 0.006(3) 0.012(3) 0.011(3)
O37 0.026(3) 0.023(3) 0.027(3) 0.005(3) 0.015(3) 0.013(3)
O38 0.059(5) 0.066(5) 0.033(4) 0.028(4) 0.012(4) 0.020(4)
O39 0.082(6) 0.032(4) 0.148(9) 0.024(5) 0.075(6) 0.032(4)
O40 0.042(5) 0.082(6) 0.071(6) -0.012(5) 0.037(4) 0.015(5)
Si1 0.0124(11) 0.0109(9) 0.0163(11) 0.0002(9) 0.0052(9) 0.0020(9)
P1 0.0200(12) 0.0177(10) 0.0208(11) 0.0048(9) 0.0063(9) 0.0055(9)
P2 0.0228(12) 0.0159(9) 0.0260(12) 0.0049(9) 0.0118(9) 0.0068(9)
P3 0.0216(12) 0.0222(10) 0.0245(12) 0.0054(9) 0.0116(9) 0.0090(10)
W1 0.0183(2) 0.01910(19) 0.0285(2) 0.00445(17) 0.01026(17) 0.00330
(17)
W2 0.0193(2) 0.01975(19) 0.0224(2) 0.00246(17) 0.00533(17) 0.00463
(17)
W3 0.0238(2) 0.01352(18) 0.0278(2) 0.00203(17) 0.00846(18) 0.00383
(17)

W4 0.0214(2) 0.02169(19) 0.0228(2) 0.00675(17) 0.01118(17) 0.00554
(17)
W5 0.0215(2) 0.01775(18) 0.0296(2) 0.00528(17) 0.01397(18) 0.00719
(17)
W6 0.0205(2) 0.01825(18) 0.0236(2) 0.00677(16) 0.00799(17) 0.00803
(17)
W7 0.0228(2) 0.02234(19) 0.0206(2) 0.00420(17) 0.00947(17) 0.00857
(18)
W8 0.0266(2) 0.01690(18) 0.0297(2) 0.00402(17) 0.01310(18) 0.01027
(18)
W9 0.0244(2) 0.01431(17) 0.0263(2) 0.00653(16) 0.00843(17) 0.00656
(17)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry. An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.376(13) . ?
C1 C3 1.381(13) . ?
C1 P1 1.809(9) . ?
C2 C4 1.383(14) . ?
C2 H2 0.9500 . ?
C3 C5 1.384(13) . ?
C3 H3 0.9500 . ?
C4 C6 1.401(14) . ?
C4 H4 0.9500 . ?
C5 C6 1.381(14) . ?
C5 H5 0.9500 . ?
C6 C7 1.501(13) . ?
C7 O38 1.229(13) . ?
C7 C8 1.478(16) . ?
C8 H8A 0.9800 . ?
C8 H8B 0.9800 . ?
C8 H8C 0.9800 . ?
C9 C11 1.397(13) . ?
C9 C10 1.407(14) . ?
C9 P2 1.787(9) . ?
C10 C12 1.379(14) . ?
C10 H10 0.9500 . ?
C11 C13 1.376(12) . ?
C11 H11 0.9500 . ?
C12 C14 1.388(16) . ?
C12 H12 0.9500 . ?
C13 C14 1.390(14) . ?
C13 H13 0.9500 . ?
C14 C15 1.490(13) . ?
C15 O39 1.228(14) . ?
C15 C16 1.507(17) . ?

C16 H16A 0.9800 . ?
C16 H16B 0.9800 . ?
C16 H16C 0.9800 . ?
C17 C18 1.372(13) . ?
C17 C19 1.385(13) . ?
C17 P3 1.797(9) . ?
C18 C20 1.381(15) . ?
C18 H18 0.9500 . ?
C19 C21 1.365(14) . ?
C19 H19 0.9500 . ?
C20 C22 1.407(14) . ?
C20 H20 0.9500 . ?
C21 C22 1.394(14) . ?
C21 H21 0.9500 . ?
C22 C23 1.464(15) . ?
C23 O40 1.241(13) . ?
C23 C24 1.483(15) . ?
C24 H24A 0.9800 . ?
C24 H24B 0.9800 . ?
C24 H24C 0.9800 . ?
N1 C33 1.521(13) . ?
N1 C37 1.525(14) . ?
N1 C29 1.527(13) . ?
N1 C25 1.542(12) . ?
C25 C26 1.498(15) . ?
C25 H25A 0.9900 . ?
C25 H25B 0.9900 . ?
C26 C27 1.520(15) . ?
C26 H26A 0.9900 . ?
C26 H26B 0.9900 . ?
C27 C28 1.538(16) . ?
C27 H27A 0.9900 . ?
C27 H27B 0.9900 . ?
C28 H28A 0.9800 . ?
C28 H28B 0.9800 . ?
C28 H28C 0.9800 . ?
C29 C30 1.482(17) . ?
C29 H29A 0.9900 . ?
C29 H29B 0.9900 . ?
C30 C31 1.58(2) . ?
C30 H30A 0.9900 . ?
C30 H30B 0.9900 . ?
C31 C32 1.465(17) . ?
C31 H31A 0.9900 . ?
C31 H31B 0.9900 . ?
C32 H32A 0.9800 . ?
C32 H32B 0.9800 . ?
C32 H32C 0.9800 . ?
C33 C34 1.526(15) . ?
C33 H33A 0.9900 . ?
C33 H33B 0.9900 . ?
C34 C35 1.509(15) . ?
C34 H34A 0.9900 . ?
C34 H34B 0.9900 . ?
C35 C36 1.510(18) . ?
C35 H35A 0.9900 . ?
C35 H35B 0.9900 . ?
C36 H36A 0.9800 . ?
C36 H36B 0.9800 . ?
C36 H36C 0.9800 . ?
C37 C38 1.531(16) . ?
C38 C39 1.52(2) . ?
C38 H38A 0.9900 . ?
C38 H38B 0.9900 . ?
C39 C40 1.486(16) . ?
C39 H39A 0.9900 . ?

C39 H39B 0.9900 . ?
C40 H40A 0.9800 . ?
C40 H40B 0.9800 . ?
C40 H40C 0.9800 . ?
N2 C45 1.475(15) . ?
N2 C41 1.510(14) . ?
N2 C53 1.523(15) . ?
N2 C49 1.535(14) . ?
C41 C42 1.507(16) . ?
C41 H41A 0.9900 . ?
C41 H41B 0.9900 . ?
C42 C43 1.526(17) . ?
C42 H42A 0.9900 . ?
C42 H42B 0.9900 . ?
C43 C44 1.54(2) . ?
C43 H43A 0.9900 . ?
C43 H43B 0.9900 . ?
C44 H44A 0.9800 . ?
C44 H44B 0.9800 . ?
C44 H44C 0.9800 . ?
C45 C46 1.512(18) . ?
C45 H45A 0.9900 . ?
C45 H45B 0.9900 . ?
C46 C47 1.49(2) . ?
C46 H46A 0.9900 . ?
C46 H46B 0.9900 . ?
C47 C48 1.51(2) . ?
C47 H47A 0.9900 . ?
C47 H47B 0.9900 . ?
C48 H48A 0.9800 . ?
C48 H48B 0.9800 . ?
C48 H48C 0.9800 . ?
C49 C50 1.491(17) . ?
C49 H49A 0.9900 . ?
C49 H49B 0.9900 . ?
C50 C51 1.530(19) . ?
C50 H50A 0.9900 . ?
C50 H50B 0.9900 . ?
C51 C52 1.554(15) . ?
C51 H51A 0.9900 . ?
C51 H51B 0.9900 . ?
C52 H52A 0.9800 . ?
C52 H52B 0.9800 . ?
C52 H52C 0.9800 . ?
C53 C54 1.500(18) . ?
C53 H53A 0.9900 . ?
C53 H53B 0.9900 . ?
C54 C55 1.52(2) . ?
C54 H54A 0.9900 . ?
C54 H54B 0.9900 . ?
C55 C56 1.509(16) . ?
C55 H55A 0.9900 . ?
C55 H55B 0.9900 . ?
C56 H56A 0.9800 . ?
C56 H56B 0.9800 . ?
C56 H56C 0.9800 . ?
N3 C65 1.511(16) . ?
N3 C61 1.514(15) . ?
N3 C57 1.517(17) . ?
N3 C69 1.528(16) . ?
C57 C58 1.59(2) . ?
C57 H57A 0.9900 . ?
C57 H57B 0.9900 . ?
C58 C59 1.52(2) . ?
C58 H58A 0.9900 . ?
C58 H58B 0.9900 . ?

```
C59 C60 1.56(2) . ?
C59 H59A 0.9900 . ?
C59 H59B 0.9900 . ?
C60 H60A 0.9800 . ?
C60 H60B 0.9800 . ?
C60 H60C 0.9800 . ?
C61 C62 1.50(2) . ?
C61 H61A 0.9900 . ?
C61 H61B 0.9900 . ?
C62 C63 1.523(19) . ?
C62 H62A 0.9900 . ?
C62 H62B 0.9900 . ?
C63 C64 1.49(3) . ?
C63 H63A 0.9900 . ?
C63 H63B 0.9900 . ?
C64 H64A 0.9800 . ?
C64 H64B 0.9800 . ?
C64 H64C 0.9800 . ?
C65 C66 1.531(17) . ?
C65 H65A 0.9900 . ?
C65 H65B 0.9900 . ?
C66 C67 1.54(2) . ?
C66 H66A 0.9900 . ?
C66 H66B 0.9900 . ?
C67 C68 1.50(2) . ?
C67 H67A 0.9900 . ?
C67 H67B 0.9900 . ?
C68 H68A 0.9800 . ?
C68 H68B 0.9800 . ?
C68 H68C 0.9800 . ?
C69 C70 1.477(17) . ?
C69 H69A 0.9900 . ?
C69 H69B 0.9900 . ?
C70 C71 1.487(19) . ?
C70 H70A 0.9900 . ?
C70 H70B 0.9900 . ?
C71 C72 1.517(16) . ?
C71 H71A 0.9900 . ?
C71 H71B 0.9900 . ?
C72 H72A 0.9800 . ?
C72 H72B 0.9800 . ?
C72 H72C 0.9800 . ?
N1S C12S 1.310(18) . ?
N1S C10S 1.40(2) . ?
N1S C11S 1.50(2) . ?
C10S H10A 0.9800 . ?
C10S H10B 0.9800 . ?
C10S H10C 0.9800 . ?
C11S H11A 0.9800 . ?
C11S H11B 0.9800 . ?
C11S H11C 0.9800 . ?
C12S O1S 1.174(17) . ?
C12S H12S 0.9500 . ?
N2S C22S 1.31(2) . ?
N2S C20S 1.40(2) . ?
N2S C21S 1.52(3) . ?
C20S H20A 0.9800 . ?
C20S H20B 0.9800 . ?
C20S H20C 0.9800 . ?
C21S H21A 0.9800 . ?
C21S H21B 0.9800 . ?
C21S H21C 0.9800 . ?
C22S O2S 1.14(2) . ?
C22S H22S 0.9500 . ?
N3S C32S 1.32(3) . ?
N3S C30S 1.42(2) . ?
```

```
N3S C31S 1.55(3) . ?
C30S H30C 0.9800 . ?
C30S H30D 0.9800 . ?
C30S H30E 0.9800 . ?
C31S H31C 0.9800 . ?
C31S H31D 0.9800 . ?
C31S H31E 0.9800 . ?
C32S O3S 1.22(4) . ?
C32S H32S 0.9500 . ?
O1 W1 1.727(7) . ?
O2 W2 1.914(6) . ?
O2 W1 1.921(6) . ?
O3 W2 1.693(7) . ?
O4 W3 1.911(7) . ?
O4 W2 1.931(6) . ?
O5 W3 1.688(6) . ?
O6 W3 1.904(6) . ?
O6 W1 1.920(6) . ?
O7 Si1 1.655(6) . ?
O7 W2 2.293(6) . ?
O7 W1 2.321(6) . ?
O7 W3 2.324(5) . ?
O8 W4 1.897(6) . ?
O8 W1 1.913(6) . ?
O9 W5 1.879(6) . ?
O9 W1 1.928(6) . ?
O10 W6 1.890(6) . ?
O10 W2 1.922(6) . ?
O11 W7 1.879(6) . ?
O11 W2 1.936(6) . ?
O12 W8 1.884(6) . ?
O12 W3 1.926(6) . ?
O13 W9 1.900(6) . ?
O13 W3 1.923(6) . ?
O14 Si1 1.614(6) . ?
O14 W9 2.217(6) . ?
O14 W4 2.230(6) . ?
O15 Si1 1.610(6) . ?
O15 W6 2.208(6) . ?
O15 W5 2.241(6) . ?
O16 Si1 1.615(6) . ?
O16 W7 2.199(6) . ?
O16 W8 2.235(6) . ?
O17 W4 1.707(7) . ?
O18 W4 1.896(6) . ?
O18 W5 1.896(6) . ?
O19 W5 1.694(7) . ?
O20 W5 1.901(6) . ?
O20 W6 1.903(6) . ?
O21 W6 1.703(6) . ?
O22 W6 1.898(6) . ?
O22 W7 1.899(6) . ?
O23 W7 1.707(6) . ?
O24 W8 1.920(6) . ?
O24 W7 1.928(6) . ?
O25 W8 1.709(6) . ?
O26 W8 1.897(6) . ?
O26 W9 1.897(6) . ?
O27 W9 1.697(6) . ?
O28 W9 1.902(7) . ?
O28 W4 1.922(6) . ?
O29 P1 1.563(7) . ?
O29 W4 1.994(6) . ?
O30 P2 1.562(6) . ?
O30 W5 1.980(6) . ?
O31 P2 1.564(6) . ?
```

```
O31 W6 1.981(6) . ?
O32 P3 1.551(6) . ?
O32 W7 2.006(6) . ?
O33 P3 1.545(6) . ?
O33 W8 1.987(6) . ?
O34 P1 1.558(6) . ?
O34 W9 1.992(6) . ?
O35 P1 1.475(6) . ?
O35 NA1 2.127(6) . ?
O36 P2 1.467(7) . ?
O36 NA1 2.091(6) . ?
O37 P3 1.467(6) . ?
O37 NA1 2.095(6) . ?
NA1 O36 2.091(6) 2_766 ?
NA1 O37 2.095(6) 2_766 ?
NA1 O35 2.127(6) 2_766 ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 C3 119.8(9) . . ?
C2 C1 P1 121.5(7) . . ?
C3 C1 P1 118.7(7) . . ?
C1 C2 C4 121.0(9) . . ?
C1 C2 H2 119.5 . . ?
C4 C2 H2 119.5 . . ?
C1 C3 C5 120.0(9) . . ?
C1 C3 H3 120.0 . . ?
C5 C3 H3 120.0 . . ?
C2 C4 C6 119.3(9) . . ?
C2 C4 H4 120.4 . . ?
C6 C4 H4 120.4 . . ?
C6 C5 C3 120.6(9) . . ?
C6 C5 H5 119.7 . . ?
C3 C5 H5 119.7 . . ?
C5 C6 C4 119.4(9) . . ?
C5 C6 C7 120.7(9) . . ?
C4 C6 C7 119.9(9) . . ?
O38 C7 C8 121.5(10) . . ?
O38 C7 C6 119.1(10) . . ?
C8 C7 C6 119.4(10) . . ?
C7 C8 H8A 109.5 . . ?
C7 C8 H8B 109.5 . . ?
H8A C8 H8B 109.5 . . ?
C7 C8 H8C 109.5 . . ?
H8A C8 H8C 109.5 . . ?
H8B C8 H8C 109.5 . . ?
C11 C9 C10 119.3(8) . . ?
C11 C9 P2 120.0(7) . . ?
C10 C9 P2 120.7(7) . . ?
C12 C10 C9 119.0(10) . . ?
C12 C10 H10 120.5 . . ?
C9 C10 H10 120.5 . . ?
C13 C11 C9 120.2(9) . . ?
C13 C11 H11 119.9 . . ?
C9 C11 H11 119.9 . . ?
C10 C12 C14 122.0(11) . . ?
C10 C12 H12 119.0 . . ?
C14 C12 H12 119.0 . . ?
C11 C13 C14 121.2(9) . . ?
C11 C13 H13 119.4 . . ?
```

```
C14 C13 H13 119.4 . . ?
C12 C14 C13 118.3(9) . . ?
C12 C14 C15 119.2(10) . . ?
C13 C14 C15 122.5(9) . . ?
O39 C15 C14 121.3(11) . . ?
O39 C15 C16 120.4(9) . . ?
C14 C15 C16 118.3(10) . . ?
C15 C16 H16A 109.5 . . ?
C15 C16 H16B 109.5 . . ?
H16A C16 H16B 109.5 . . ?
C15 C16 H16C 109.5 . . ?
H16A C16 H16C 109.5 . . ?
H16B C16 H16C 109.5 . . ?
C18 C17 C19 119.0(9) . . ?
C18 C17 P3 120.7(7) . . ?
C19 C17 P3 120.3(7) . . ?
C17 C18 C20 120.4(9) . . ?
C17 C18 H18 119.8 . . ?
C20 C18 H18 119.8 . . ?
C21 C19 C17 121.1(9) . . ?
C21 C19 H19 119.4 . . ?
C17 C19 H19 119.4 . . ?
C18 C20 C22 120.9(9) . . ?
C18 C20 H20 119.5 . . ?
C22 C20 H20 119.5 . . ?
C19 C21 C22 121.0(9) . . ?
C19 C21 H21 119.5 . . ?
C22 C21 H21 119.5 . . ?
C21 C22 C20 117.3(9) . . ?
C21 C22 C23 121.8(9) . . ?
C20 C22 C23 120.8(9) . . ?
O40 C23 C22 120.5(10) . . ?
O40 C23 C24 119.4(10) . . ?
C22 C23 C24 120.1(10) . . ?
C23 C24 H24A 109.5 . . ?
C23 C24 H24B 109.5 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.5 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
C33 N1 C37 112.2(8) . . ?
C33 N1 C29 109.9(7) . . ?
C37 N1 C29 107.2(8) . . ?
C33 N1 C25 108.9(7) . . ?
C37 N1 C25 108.5(7) . . ?
C29 N1 C25 110.1(8) . . ?
C26 C25 N1 116.1(8) . . ?
C26 C25 H25A 108.2 . . ?
N1 C25 H25A 108.3 . . ?
C26 C25 H25B 108.3 . . ?
N1 C25 H25B 108.3 . . ?
H25A C25 H25B 107.4 . . ?
C25 C26 C27 108.8(9) . . ?
C25 C26 H26A 109.9 . . ?
C27 C26 H26A 109.9 . . ?
C25 C26 H26B 109.9 . . ?
C27 C26 H26B 109.9 . . ?
H26A C26 H26B 108.3 . . ?
C26 C27 C28 112.2(10) . . ?
C26 C27 H27A 109.2 . . ?
C28 C27 H27A 109.2 . . ?
C26 C27 H27B 109.2 . . ?
C28 C27 H27B 109.2 . . ?
H27A C27 H27B 107.9 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.5 . . ?
```

```
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.5 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
C30 C29 N1 115.1(9) . . ?
C30 C29 H29A 108.5 . . ?
N1 C29 H29A 108.5 . . ?
C30 C29 H29B 108.5 . . ?
N1 C29 H29B 108.5 . . ?
H29A C29 H29B 107.5 . . ?
C29 C30 C31 107.9(12) . . ?
C29 C30 H30A 110.1 . . ?
C31 C30 H30A 110.1 . . ?
C29 C30 H30B 110.1 . . ?
C31 C30 H30B 110.1 . . ?
H30A C30 H30B 108.4 . . ?
C32 C31 C30 112.7(17) . . ?
C32 C31 H31A 109.1 . . ?
C30 C31 H31A 109.1 . . ?
C32 C31 H31B 109.0 . . ?
C30 C31 H31B 109.0 . . ?
H31A C31 H31B 107.8 . . ?
C31 C32 H32A 109.5 . . ?
C31 C32 H32B 109.5 . . ?
H32A C32 H32B 109.5 . . ?
C31 C32 H32C 109.5 . . ?
H32A C32 H32C 109.5 . . ?
H32B C32 H32C 109.5 . . ?
N1 C33 C34 115.6(8) . . ?
N1 C33 H33A 108.4 . . ?
C34 C33 H33A 108.4 . . ?
N1 C33 H33B 108.4 . . ?
C34 C33 H33B 108.4 . . ?
H33A C33 H33B 107.4 . . ?
C35 C34 C33 110.3(9) . . ?
C35 C34 H34A 109.6 . . ?
C33 C34 H34A 109.6 . . ?
C35 C34 H34B 109.6 . . ?
C33 C34 H34B 109.6 . . ?
H34A C34 H34B 108.1 . . ?
C34 C35 C36 113.6(11) . . ?
C34 C35 H35A 108.8 . . ?
C36 C35 H35A 108.9 . . ?
C34 C35 H35B 108.9 . . ?
C36 C35 H35B 108.8 . . ?
H35A C35 H35B 107.7 . . ?
C35 C36 H36A 109.5 . . ?
C35 C36 H36B 109.5 . . ?
H36A C36 H36B 109.5 . . ?
C35 C36 H36C 109.5 . . ?
H36A C36 H36C 109.5 . . ?
H36B C36 H36C 109.5 . . ?
N1 C37 C38 115.0(9) . . ?
C39 C38 C37 106.0(11) . . ?
C39 C38 H38A 110.5 . . ?
C37 C38 H38A 110.5 . . ?
C39 C38 H38B 110.5 . . ?
C37 C38 H38B 110.5 . . ?
H38A C38 H38B 108.7 . . ?
C40 C39 C38 116.9(17) . . ?
C40 C39 H39A 108.1 . . ?
C38 C39 H39A 108.1 . . ?
C40 C39 H39B 108.1 . . ?
C38 C39 H39B 108.1 . . ?
H39A C39 H39B 107.3 . . ?
C39 C40 H40A 109.4 . . ?
```

```
C39 C40 H40B 109.5 . . ?
H40A C40 H40B 109.5 . . ?
C39 C40 H40C 109.5 . . ?
H40A C40 H40C 109.5 . . ?
H40B C40 H40C 109.5 . . ?
C45 N2 C41 111.2(9) . . ?
C45 N2 C53 108.1(9) . . ?
C41 N2 C53 110.4(9) . . ?
C45 N2 C49 110.4(9) . . ?
C41 N2 C49 107.5(8) . . ?
C53 N2 C49 109.1(9) . . ?
C42 C41 N2 115.8(10) . . ?
C42 C41 H41A 108.3 . . ?
N2 C41 H41A 108.3 . . ?
C42 C41 H41B 108.3 . . ?
N2 C41 H41B 108.3 . . ?
H41A C41 H41B 107.4 . . ?
C41 C42 C43 112.4(11) . . ?
C41 C42 H42A 109.1 . . ?
C43 C42 H42A 109.1 . . ?
C41 C42 H42B 109.1 . . ?
C43 C42 H42B 109.1 . . ?
H42A C42 H42B 107.9 . . ?
C42 C43 C44 113.1(14) . . ?
C42 C43 H43A 109.0 . . ?
C44 C43 H43A 109.0 . . ?
C42 C43 H43B 109.0 . . ?
C44 C43 H43B 109.0 . . ?
H43A C43 H43B 107.8 . . ?
C43 C44 H44A 109.5 . . ?
C43 C44 H44B 109.5 . . ?
H44A C44 H44B 109.5 . . ?
C43 C44 H44C 109.5 . . ?
H44A C44 H44C 109.5 . . ?
H44B C44 H44C 109.5 . . ?
N2 C45 C46 116.2(10) . . ?
N2 C45 H45A 108.2 . . ?
C46 C45 H45A 108.2 . . ?
N2 C45 H45B 108.2 . . ?
C46 C45 H45B 108.3 . . ?
H45A C45 H45B 107.4 . . ?
C47 C46 C45 112.1(12) . . ?
C47 C46 H46A 109.2 . . ?
C45 C46 H46A 109.2 . . ?
C47 C46 H46B 109.2 . . ?
C45 C46 H46B 109.2 . . ?
H46A C46 H46B 107.9 . . ?
C46 C47 C48 113.7(13) . . ?
C46 C47 H47A 108.8 . . ?
C48 C47 H47A 108.8 . . ?
C46 C47 H47B 108.8 . . ?
C48 C47 H47B 108.8 . . ?
H47A C47 H47B 107.7 . . ?
C47 C48 H48A 109.5 . . ?
C47 C48 H48B 109.5 . . ?
H48A C48 H48B 109.5 . . ?
C47 C48 H48C 109.5 . . ?
H48A C48 H48C 109.5 . . ?
H48B C48 H48C 109.5 . . ?
C50 C49 N2 116.0(10) . . ?
C50 C49 H49A 108.3 . . ?
N2 C49 H49A 108.3 . . ?
C50 C49 H49B 108.3 . . ?
N2 C49 H49B 108.3 . . ?
H49A C49 H49B 107.4 . . ?
C49 C50 C51 110.7(11) . . ?
```

```
C49 C50 H50A 109.5 . . ?
C51 C50 H50A 109.5 . . ?
C49 C50 H50B 109.5 . . ?
C51 C50 H50B 109.5 . . ?
H50A C50 H50B 108.1 . . ?
C50 C51 C52 112.0(13) . . ?
C50 C51 H51A 109.2 . . ?
C52 C51 H51A 109.2 . . ?
C50 C51 H51B 109.2 . . ?
C52 C51 H51B 109.2 . . ?
H51A C51 H51B 107.9 . . ?
C51 C52 H52A 109.5 . . ?
C51 C52 H52B 109.4 . . ?
H52A C52 H52B 109.5 . . ?
C51 C52 H52C 109.5 . . ?
H52A C52 H52C 109.5 . . ?
H52B C52 H52C 109.5 . . ?
C54 C53 N2 117.1(10) . . ?
C54 C53 H53A 108.0 . . ?
N2 C53 H53A 108.0 . . ?
C54 C53 H53B 108.0 . . ?
N2 C53 H53B 108.0 . . ?
H53A C53 H53B 107.3 . . ?
C53 C54 C55 110.1(12) . . ?
C53 C54 H54A 109.6 . . ?
C55 C54 H54A 109.6 . . ?
C53 C54 H54B 109.6 . . ?
C55 C54 H54B 109.6 . . ?
H54A C54 H54B 108.2 . . ?
C56 C55 C54 114.7(16) . . ?
C56 C55 H55A 108.6 . . ?
C54 C55 H55A 108.6 . . ?
C56 C55 H55B 108.6 . . ?
C54 C55 H55B 108.6 . . ?
H55A C55 H55B 107.6 . . ?
C55 C56 H56A 109.4 . . ?
C55 C56 H56B 109.5 . . ?
H56A C56 H56B 109.5 . . ?
C55 C56 H56C 109.5 . . ?
H56A C56 H56C 109.5 . . ?
H56B C56 H56C 109.5 . . ?
C65 N3 C61 111.5(10) . . ?
C65 N3 C57 107.7(10) . . ?
C61 N3 C57 109.6(10) . . ?
C65 N3 C69 106.7(10) . . ?
C61 N3 C69 109.5(9) . . ?
C57 N3 C69 111.8(10) . . ?
N3 C57 C58 113.3(10) . . ?
N3 C57 H57A 108.9 . . ?
C58 C57 H57A 108.9 . . ?
N3 C57 H57B 108.9 . . ?
C58 C57 H57B 108.9 . . ?
H57A C57 H57B 107.7 . . ?
C59 C58 C57 107.9(12) . . ?
C59 C58 H58A 110.1 . . ?
C57 C58 H58A 110.1 . . ?
C59 C58 H58B 110.1 . . ?
C57 C58 H58B 110.1 . . ?
H58A C58 H58B 108.4 . . ?
C58 C59 C60 108.6(16) . . ?
C58 C59 H59A 110.0 . . ?
C60 C59 H59A 110.0 . . ?
C58 C59 H59B 110.0 . . ?
C60 C59 H59B 110.0 . . ?
H59A C59 H59B 108.4 . . ?
C59 C60 H60A 109.5 . . ?
```

```
C59 C60 H60B 109.5 . . ?
H60A C60 H60B 109.5 . . ?
C59 C60 H60C 109.5 . . ?
H60A C60 H60C 109.5 . . ?
H60B C60 H60C 109.5 . . ?
C62 C61 N3 115.8(11) . . ?
C62 C61 H61A 108.3 . . ?
N3 C61 H61A 108.4 . . ?
C62 C61 H61B 108.3 . . ?
N3 C61 H61B 108.3 . . ?
H61A C61 H61B 107.4 . . ?
C61 C62 C63 110.7(13) . . ?
C61 C62 H62A 109.5 . . ?
C63 C62 H62A 109.5 . . ?
C61 C62 H62B 109.5 . . ?
C63 C62 H62B 109.5 . . ?
H62A C62 H62B 108.1 . . ?
C64 C63 C62 113.8(16) . . ?
C64 C63 H63A 108.8 . . ?
C62 C63 H63A 108.8 . . ?
C64 C63 H63B 108.8 . . ?
C62 C63 H63B 108.8 . . ?
H63A C63 H63B 107.7 . . ?
C63 C64 H64A 109.5 . . ?
C63 C64 H64B 109.5 . . ?
H64A C64 H64B 109.5 . . ?
C63 C64 H64C 109.4 . . ?
H64A C64 H64C 109.5 . . ?
H64B C64 H64C 109.5 . . ?
N3 C65 C66 115.9(10) . . ?
N3 C65 H65A 108.3 . . ?
C66 C65 H65A 108.3 . . ?
N3 C65 H65B 108.3 . . ?
C66 C65 H65B 108.3 . . ?
H65A C65 H65B 107.4 . . ?
C65 C66 C67 110.0(11) . . ?
C65 C66 H66A 109.7 . . ?
C67 C66 H66A 109.7 . . ?
C65 C66 H66B 109.7 . . ?
C67 C66 H66B 109.6 . . ?
H66A C66 H66B 108.2 . . ?
C68 C67 C66 110.4(13) . . ?
C68 C67 H67A 109.6 . . ?
C66 C67 H67A 109.6 . . ?
C68 C67 H67B 109.6 . . ?
C66 C67 H67B 109.6 . . ?
H67A C67 H67B 108.1 . . ?
C67 C68 H68A 109.5 . . ?
C67 C68 H68B 109.5 . . ?
H68A C68 H68B 109.5 . . ?
C67 C68 H68C 109.5 . . ?
H68A C68 H68C 109.5 . . ?
H68B C68 H68C 109.5 . . ?
C70 C69 N3 117.7(11) . . ?
C70 C69 H69A 107.9 . . ?
N3 C69 H69A 107.9 . . ?
C70 C69 H69B 107.9 . . ?
N3 C69 H69B 107.9 . . ?
H69A C69 H69B 107.2 . . ?
C69 C70 C71 114.1(12) . . ?
C69 C70 H70A 108.8 . . ?
C71 C70 H70A 108.7 . . ?
C69 C70 H70B 108.7 . . ?
C71 C70 H70B 108.7 . . ?
H70A C70 H70B 107.6 . . ?
C70 C71 C72 111.6(15) . . ?
```

```
C70 C71 H71A 109.3 . . ?
C72 C71 H71A 109.3 . . ?
C70 C71 H71B 109.3 . . ?
C72 C71 H71B 109.3 . . ?
H71A C71 H71B 108.0 . . ?
C71 C72 H72A 109.5 . . ?
C71 C72 H72B 109.5 . . ?
H72A C72 H72B 109.5 . . ?
C71 C72 H72C 109.5 . . ?
H72A C72 H72C 109.5 . . ?
H72B C72 H72C 109.5 . . ?
C12S N1S C10S 123.7(16) . . ?
C12S N1S C11S 118.8(16) . . ?
C10S N1S C11S 117.3(17) . . ?
N1S C10S H10A 109.4 . . ?
N1S C10S H10B 109.5 . . ?
H10A C10S H10B 109.5 . . ?
N1S C10S H10C 109.4 . . ?
H10A C10S H10C 109.5 . . ?
H10B C10S H10C 109.5 . . ?
N1S C11S H11A 109.5 . . ?
N1S C11S H11B 109.4 . . ?
H11A C11S H11B 109.5 . . ?
N1S C11S H11C 109.4 . . ?
H11A C11S H11C 109.5 . . ?
H11B C11S H11C 109.5 . . ?
O1S C12S N1S 128.6(17) . . ?
O1S C12S H12S 115.7 . . ?
N1S C12S H12S 115.7 . . ?
C22S N2S C20S 127(2) . . ?
C22S N2S C21S 122(3) . . ?
C20S N2S C21S 112(2) . . ?
N2S C20S H20A 109.4 . . ?
N2S C20S H20B 109.5 . . ?
H20A C20S H20B 109.5 . . ?
N2S C20S H20C 109.5 . . ?
H20A C20S H20C 109.5 . . ?
H20B C20S H20C 109.5 . . ?
N2S C21S H21A 109.5 . . ?
N2S C21S H21B 109.4 . . ?
H21A C21S H21B 109.5 . . ?
N2S C21S H21C 109.5 . . ?
H21A C21S H21C 109.5 . . ?
H21B C21S H21C 109.5 . . ?
O2S C22S N2S 134(3) . . ?
O2S C22S H22S 113.0 . . ?
N2S C22S H22S 113.1 . . ?
C32S N3S C30S 137(3) . . ?
C32S N3S C31S 116(3) . . ?
C30S N3S C31S 106(2) . . ?
N3S C30S H30C 109.6 . . ?
N3S C30S H30D 107.9 . . ?
H30C C30S H30D 109.5 . . ?
N3S C30S H30E 111.0 . . ?
H30C C30S H30E 109.5 . . ?
H30D C30S H30E 109.5 . . ?
N3S C31S H31C 109.3 . . ?
N3S C31S H31D 111.2 . . ?
H31C C31S H31D 109.5 . . ?
N3S C31S H31E 107.9 . . ?
H31C C31S H31E 109.5 . . ?
H31D C31S H31E 109.5 . . ?
O3S C32S N3S 134(6) . . ?
O3S C32S H32S 110.1 . . ?
N3S C32S H32S 111.0 . . ?
W2 O2 W1 121.3(3) . . ?
```

```
W3 O4 W2 121.2(3) . . ?
W3 O6 W1 121.8(3) . . ?
Si1 O7 W2 123.1(3) . . ?
Si1 O7 W1 123.6(3) . . ?
W2 O7 W1 92.9(2) . . ?
Si1 O7 W3 123.6(3) . . ?
W2 O7 W3 92.90(19) . . ?
W1 O7 W3 92.0(2) . . ?
W4 O8 W1 149.7(3) . . ?
W5 O9 W1 151.0(4) . . ?
W6 O10 W2 151.5(4) . . ?
W7 O11 W2 149.6(3) . . ?
W8 O12 W3 150.1(3) . . ?
W9 O13 W3 149.2(3) . . ?
Si1 O14 W9 127.0(3) . . ?
Si1 O14 W4 128.2(3) . . ?
W9 O14 W4 93.8(2) . . ?
Si1 O15 W6 128.2(3) . . ?
Si1 O15 W5 127.2(3) . . ?
W6 O15 W5 93.6(2) . . ?
Si1 O16 W7 127.9(3) . . ?
Si1 O16 W8 127.0(3) . . ?
W7 O16 W8 94.0(2) . . ?
W4 O18 W5 149.0(3) . . ?
W5 O20 W6 117.0(3) . . ?
W6 O22 W7 147.5(3) . . ?
W8 O24 W7 114.9(3) . . ?
W8 O26 W9 148.0(4) . . ?
W9 O28 W4 116.2(3) . . ?
P1 O29 W4 132.6(3) . . ?
P2 O30 W5 133.9(4) . . ?
P2 O31 W6 132.1(3) . . ?
P3 O32 W7 132.4(4) . . ?
P3 O33 W8 134.0(4) . . ?
P1 O34 W9 132.7(4) . . ?
P1 O35 NA1 172.5(4) . . ?
P2 O36 NA1 171.3(4) . . ?
P3 O37 NA1 171.5(4) . . ?
O15 Si1 O14 113.0(3) . . ?
O15 Si1 O16 113.1(3) . . ?
O14 Si1 O16 114.1(3) . . ?
O15 Si1 O7 105.3(3) . . ?
O14 Si1 O7 105.0(3) . . ?
O16 Si1 O7 105.2(3) . . ?
O35 P1 O34 115.2(3) . . ?
O35 P1 O29 115.0(4) . . ?
O34 P1 O29 107.1(3) . . ?
O35 P1 C1 110.3(4) . . ?
O34 P1 C1 103.8(4) . . ?
O29 P1 C1 104.4(4) . . ?
O36 P2 O30 116.2(4) . . ?
O36 P2 O31 113.7(4) . . ?
O30 P2 O31 106.4(3) . . ?
O36 P2 C9 111.2(4) . . ?
O30 P2 C9 102.5(4) . . ?
O31 P2 C9 105.7(4) . . ?
O37 P3 O33 116.1(4) . . ?
O37 P3 O32 113.5(4) . . ?
O33 P3 O32 106.6(3) . . ?
O37 P3 C17 111.1(4) . . ?
O33 P3 C17 103.5(4) . . ?
O32 P3 C17 105.0(4) . . ?
O1 W1 O8 100.5(3) . . ?
O1 W1 O6 99.7(3) . . ?
O8 W1 O6 90.4(3) . . ?
O1 W1 O2 100.7(3) . . ?
```

```
O8 W1 O2 158.5(3) . . ?
O6 W1 O2 89.0(3) . . ?
O1 W1 O9 101.9(3) . . ?
O8 W1 O9 83.8(3) . . ?
O6 W1 O9 158.3(3) . . ?
O2 W1 O9 88.9(3) . . ?
O1 W1 O7 169.8(3) . . ?
O8 W1 O7 86.8(2) . . ?
O6 W1 O7 73.0(2) . . ?
O2 W1 O7 72.5(2) . . ?
O9 W1 O7 85.8(2) . . ?
O3 W2 O2 99.3(3) . . ?
O3 W2 O10 101.5(3) . . ?
O2 W2 O10 90.9(3) . . ?
O3 W2 O4 99.7(3) . . ?
O2 W2 O4 89.4(3) . . ?
O10 W2 O4 158.4(3) . . ?
O3 W2 O11 101.2(3) . . ?
O2 W2 O11 159.4(3) . . ?
O10 W2 O11 83.1(3) . . ?
O4 W2 O11 89.2(3) . . ?
O3 W2 O7 169.5(3) . . ?
O2 W2 O7 73.3(2) . . ?
O10 W2 O7 86.3(2) . . ?
O4 W2 O7 73.1(2) . . ?
O11 W2 O7 86.6(2) . . ?
O5 W3 O6 99.6(3) . . ?
O5 W3 O4 99.2(3) . . ?
O6 W3 O4 89.5(3) . . ?
O5 W3 O13 102.1(3) . . ?
O6 W3 O13 89.6(3) . . ?
O4 W3 O13 158.5(2) . . ?
O5 W3 O12 101.6(3) . . ?
O6 W3 O12 158.8(2) . . ?
O4 W3 O12 89.1(3) . . ?
O13 W3 O12 84.0(3) . . ?
O5 W3 O7 168.9(3) . . ?
O6 W3 O7 73.2(2) . . ?
O4 W3 O7 72.7(2) . . ?
O13 W3 O7 86.5(2) . . ?
O12 W3 O7 86.2(2) . . ?
O17 W4 O18 100.1(3) . . ?
O17 W4 O8 100.2(3) . . ?
O18 W4 O8 87.8(3) . . ?
O17 W4 O28 100.7(3) . . ?
O18 W4 O28 159.2(3) . . ?
O8 W4 O28 90.0(3) . . ?
O17 W4 O29 96.1(3) . . ?
O18 W4 O29 90.1(2) . . ?
O8 W4 O29 163.7(3) . . ?
O28 W4 O29 86.2(2) . . ?
O17 W4 O14 173.3(3) . . ?
O18 W4 O14 84.7(2) . . ?
O8 W4 O14 84.7(2) . . ?
O28 W4 O14 74.5(2) . . ?
O29 W4 O14 79.1(2) . . ?
O19 W5 O9 101.4(3) . . ?
O19 W5 O18 101.1(3) . . ?
O9 W5 O18 87.0(3) . . ?
O19 W5 O20 99.7(3) . . ?
O9 W5 O20 91.9(3) . . ?
O18 W5 O20 158.9(3) . . ?
O19 W5 O30 95.4(3) . . ?
O9 W5 O30 163.1(3) . . ?
O18 W5 O30 88.1(2) . . ?
O20 W5 O30 86.9(3) . . ?
```

```
O19 W5 O15 171.4(3) . . ?
O9 W5 O15 85.0(2) . . ?
O18 W5 O15 84.8(2) . . ?
O20 W5 O15 74.1(2) . . ?
O30 W5 O15 78.5(2) . . ?
O21 W6 O10 100.1(3) . . ?
O21 W6 O22 100.7(3) . . ?
O10 W6 O22 87.9(3) . . ?
O21 W6 O20 100.1(3) . . ?
O10 W6 O20 89.5(3) . . ?
O22 W6 O20 159.2(3) . . ?
O21 W6 O31 95.8(3) . . ?
O10 W6 O31 164.0(3) . . ?
O22 W6 O31 90.7(2) . . ?
O20 W6 O31 86.2(2) . . ?
O21 W6 O15 173.9(3) . . ?
O10 W6 O15 83.5(2) . . ?
O22 W6 O15 84.3(2) . . ?
O20 W6 O15 74.9(2) . . ?
O31 W6 O15 80.5(2) . . ?
O23 W7 O11 100.0(3) . . ?
O23 W7 O22 99.7(3) . . ?
O11 W7 O22 89.0(2) . . ?
O23 W7 O24 100.0(3) . . ?
O11 W7 O24 90.8(3) . . ?
O22 W7 O24 160.1(2) . . ?
O23 W7 O32 95.2(3) . . ?
O11 W7 O32 164.7(3) . . ?
O22 W7 O32 89.5(2) . . ?
O24 W7 O32 85.5(2) . . ?
O23 W7 O16 173.6(3) . . ?
O11 W7 O16 85.0(2) . . ?
O22 W7 O16 84.4(2) . . ?
O24 W7 O16 75.8(2) . . ?
O32 W7 O16 79.8(2) . . ?
O25 W8 O12 100.4(3) . . ?
O25 W8 O26 100.8(3) . . ?
O12 W8 O26 88.3(3) . . ?
O25 W8 O24 99.1(3) . . ?
O12 W8 O24 90.9(3) . . ?
O26 W8 O24 159.9(2) . . ?
O25 W8 O33 95.9(3) . . ?
O12 W8 O33 163.7(2) . . ?
O26 W8 O33 88.7(2) . . ?
O24 W8 O33 86.4(3) . . ?
O25 W8 O16 172.1(3) . . ?
O12 W8 O16 85.1(2) . . ?
O26 W8 O16 84.9(2) . . ?
O24 W8 O16 75.1(2) . . ?
O33 W8 O16 78.7(2) . . ?
O27 W9 O26 99.7(3) . . ?
O27 W9 O13 100.0(3) . . ?
O26 W9 O13 88.0(3) . . ?
O27 W9 O28 99.3(3) . . ?
O26 W9 O28 160.8(3) . . ?
O13 W9 O28 91.1(3) . . ?
O27 W9 O34 95.1(3) . . ?
O26 W9 O34 89.1(2) . . ?
O13 W9 O34 164.9(3) . . ?
O28 W9 O34 86.7(2) . . ?
O27 W9 O14 172.1(3) . . ?
O26 W9 O14 85.6(2) . . ?
O13 W9 O14 85.9(2) . . ?
O28 W9 O14 75.2(2) . . ?
O34 W9 O14 79.1(2) . . ?
O36 NA1 O36 180.000(2) . 2_766 ?
```

```
O36 NA1 O37 89.6(2) . 2_766 ?
O36 NA1 O37 90.4(2) 2_766 2_766 ?
O36 NA1 O37 90.4(2) . . ?
O36 NA1 O37 89.6(2) 2_766 . ?
O37 NA1 O37 180.000(1) 2_766 . ?
O36 NA1 O35 88.7(2) . . ?
O36 NA1 O35 91.3(2) 2_766 . ?
O37 NA1 O35 90.1(2) 2_766 . ?
O37 NA1 O35 89.9(2) . . ?
O36 NA1 O35 91.3(2) . 2_766 ?
O36 NA1 O35 88.7(2) 2_766 2_766 ?
O37 NA1 O35 89.9(2) 2_766 2_766 ?
O37 NA1 O35 90.1(2) . 2_766 ?
O35 NA1 O35 180.0(3) . 2_766 ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
C3 C1 C2 C4 0.7(16) . . . . ?
P1 C1 C2 C4 -179.5(9) . . . . ?
C2 C1 C3 C5 -1.4(15) . . . . ?
P1 C1 C3 C5 178.9(8) . . . . ?
C1 C2 C4 C6 -0.3(17) . . . . ?
C1 C3 C5 C6 1.6(16) . . . . ?
C3 C5 C6 C4 -1.2(16) . . . . ?
C3 C5 C6 C7 178.3(10) . . . . ?
C2 C4 C6 C5 0.6(17) . . . . ?
C2 C4 C6 C7 -178.9(11) . . . . ?
C5 C6 C7 O38 173.0(11) . . . . ?
C4 C6 C7 O38 -7.5(16) . . . . ?
C5 C6 C7 C8 -6.6(17) . . . . ?
C4 C6 C7 C8 172.8(11) . . . . ?
C11 C9 C10 C12 -0.4(18) . . . . ?
P2 C9 C10 C12 -179.6(10) . . . . ?
C10 C9 C11 C13 0.9(15) . . . . ?
P2 C9 C11 C13 -179.8(8) . . . . ?
C9 C10 C12 C14 0(2) . . . . ?
C9 C11 C13 C14 -1.0(16) . . . . ?
C10 C12 C14 C13 0(2) . . . . ?
C10 C12 C14 C15 -180.0(13) . . . . ?
C11 C13 C14 C12 0.5(17) . . . . ?
C11 C13 C14 C15 -179.5(11) . . . . ?
C12 C14 C15 O39 0(2) . . . . ?
C13 C14 C15 O39 179.9(13) . . . . ?
C12 C14 C15 C16 -179.5(12) . . . . ?
C13 C14 C15 C16 0.5(18) . . . . ?
C19 C17 C18 C20 -3.9(17) . . . . ?
P3 C17 C18 C20 178.1(10) . . . . ?
C18 C17 C19 C21 2.9(16) . . . . ?
P3 C17 C19 C21 -179.1(8) . . . . ?
C17 C18 C20 C22 2.7(19) . . . . ?
C17 C19 C21 C22 -0.6(16) . . . . ?
C19 C21 C22 C20 -0.6(16) . . . . ?
C19 C21 C22 C23 177.0(11) . . . . ?
C18 C20 C22 C21 -0.4(18) . . . . ?
C18 C20 C22 C23 -178.0(12) . . . . ?
C21 C22 C23 O40 -166.8(12) . . . . ?
C20 C22 C23 O40 10.7(18) . . . . ?
```

```
C21 C22 C23 C24 13.2(17) . . . . ?
C20 C22 C23 C24 -169.3(12) . . . . ?
C33 N1 C25 C26 179.9(10) . . . . ?
C37 N1 C25 C26 57.4(12) . . . . ?
C29 N1 C25 C26 -59.6(12) . . . . ?
N1 C25 C26 C27 171.9(9) . . . . ?
C25 C26 C27 C28 175.4(11) . . . . ?
C33 N1 C29 C30 59.2(13) . . . . ?
C37 N1 C29 C30 -178.6(11) . . . . ?
C25 N1 C29 C30 -60.7(13) . . . . ?
N1 C29 C30 C31 -178.9(13) . . . . ?
C29 C30 C31 C32 159(2) . . . . ?
C37 N1 C33 C34 47.6(11) . . . . ?
C29 N1 C33 C34 166.8(9) . . . . ?
C25 N1 C33 C34 -72.5(11) . . . . ?
N1 C33 C34 C35 168.4(9) . . . . ?
C33 C34 C35 C36 176.2(11) . . . . ?
C33 N1 C37 C38 56.9(12) . . . . ?
C29 N1 C37 C38 -63.8(12) . . . . ?
C25 N1 C37 C38 177.3(10) . . . . ?
N1 C37 C38 C39 -178.2(12) . . . . ?
C37 C38 C39 C40 -173.7(19) . . . . ?
C45 N2 C41 C42 -60.4(13) . . . . ?
C53 N2 C41 C42 59.7(13) . . . . ?
C49 N2 C41 C42 178.6(11) . . . . ?
N2 C41 C42 C43 -176.2(11) . . . . ?
C41 C42 C43 C44 -178.4(13) . . . . ?
C41 N2 C45 C46 -65.2(13) . . . . ?
C53 N2 C45 C46 173.4(11) . . . . ?
C49 N2 C45 C46 54.1(13) . . . . ?
N2 C45 C46 C47 -179.2(12) . . . . ?
C45 C46 C47 C48 176.1(14) . . . . ?
C45 N2 C49 C50 55.5(14) . . . . ?
C41 N2 C49 C50 176.9(11) . . . . ?
C53 N2 C49 C50 -63.2(14) . . . . ?
N2 C49 C50 C51 -171.8(12) . . . . ?
C49 C50 C51 C52 171.7(14) . . . . ?
C45 N2 C53 C54 175.2(11) . . . . ?
C41 N2 C53 C54 53.3(14) . . . . ?
C49 N2 C53 C54 -64.7(13) . . . . ?
N2 C53 C54 C55 173.8(11) . . . . ?
C53 C54 C55 C56 -178.7(16) . . . . ?
C65 N3 C57 C58 -179.0(10) . . . . ?
C61 N3 C57 C58 -57.5(14) . . . . ?
C69 N3 C57 C58 64.1(13) . . . . ?
N3 C57 C58 C59 -166.2(11) . . . . ?
C57 C58 C59 C60 -168.5(13) . . . . ?
C65 N3 C61 C62 -49.2(16) . . . . ?
C57 N3 C61 C62 -168.4(12) . . . . ?
C69 N3 C61 C62 68.6(16) . . . . ?
N3 C61 C62 C63 -174.7(12) . . . . ?
C61 C62 C63 C64 -176.7(15) . . . . ?
C61 N3 C65 C66 -55.5(16) . . . . ?
C57 N3 C65 C66 64.9(14) . . . . ?
C69 N3 C65 C66 -175.0(12) . . . . ?
N3 C65 C66 C67 179.0(12) . . . . ?
C65 C66 C67 C68 -173.1(15) . . . . ?
C65 N3 C69 C70 -67.4(17) . . . . ?
C61 N3 C69 C70 171.8(14) . . . . ?
C57 N3 C69 C70 50.1(17) . . . . ?
N3 C69 C70 C71 178.1(14) . . . . ?
C69 C70 C71 C72 -67.4(19) . . . . ?
C10S N1S C12S O1S 178(2) . . . . ?
C11S N1S C12S O1S 4(3) . . . . ?
C20S N2S C22S O2S 171(4) . . . . ?
C21S N2S C22S O2S -6(7) . . . . ?
```

```
C30S N3S C32S O3S -178(8) . . . . ?
C31S N3S C32S O3S 7(17) . . . . ?
W6 O15 Si1 O14 177.9(3) . . . . ?
W5 O15 Si1 O14 -47.9(5) . . . . ?
W6 O15 Si1 O16 46.3(5) . . . . ?
W5 O15 Si1 O16 -179.5(3) . . . . ?
W6 O15 Si1 O7 -68.0(4) . . . . ?
W5 O15 Si1 O7 66.2(5) . . . . ?
W9 O14 Si1 O15 -178.3(3) . . . . ?
W4 O14 Si1 O15 47.5(5) . . . . ?
W9 O14 Si1 O16 -47.2(5) . . . . ?
W4 O14 Si1 O16 178.6(3) . . . . ?
W9 O14 Si1 O7 67.4(4) . . . . ?
W4 O14 Si1 O7 -66.7(4) . . . . ?
W7 O16 Si1 O15 -47.1(5) . . . . ?
W8 O16 Si1 O15 178.7(3) . . . . ?
W7 O16 Si1 O14 -178.2(3) . . . . ?
W8 O16 Si1 O14 47.6(5) . . . . ?
W7 O16 Si1 O7 67.3(4) . . . . ?
W8 O16 Si1 O7 -66.9(4) . . . . ?
W2 O7 Si1 O15 59.4(4) . . . . ?
W1 O7 Si1 O15 -60.8(4) . . . . ?
W3 O7 Si1 O15 179.8(3) . . . . ?
W2 O7 Si1 O14 179.0(3) . . . . ?
W1 O7 Si1 O14 58.8(4) . . . . ?
W3 O7 Si1 O14 -60.7(4) . . . . ?
W2 O7 Si1 O16 -60.3(4) . . . . ?
W1 O7 Si1 O16 179.5(3) . . . . ?
W3 O7 Si1 O16 60.1(4) . . . . ?
NA1 O35 P1 O34 -108(3) . . . . ?
NA1 O35 P1 O29 127(3) . . . . ?
NA1 O35 P1 C1 9(3) . . . . ?
W9 O34 P1 O35 -95.0(6) . . . . ?
W9 O34 P1 O29 34.2(6) . . . . ?
W9 O34 P1 C1 144.3(5) . . . . ?
W4 O29 P1 O35 94.5(5) . . . . ?
W4 O29 P1 O34 -34.9(6) . . . . ?
W4 O29 P1 C1 -144.6(5) . . . . ?
C2 C1 P1 O35 -174.1(8) . . . . ?
C3 C1 P1 O35 5.7(9) . . . . ?
C2 C1 P1 O34 -50.1(9) . . . . ?
C3 C1 P1 O34 129.6(7) . . . . ?
C2 C1 P1 O29 61.9(9) . . . . ?
C3 C1 P1 O29 -118.3(7) . . . . ?
NA1 O36 P2 O30 -110(3) . . . . ?
NA1 O36 P2 O31 126(3) . . . . ?
NA1 O36 P2 C9 7(3) . . . . ?
W5 O30 P2 O36 -94.8(6) . . . . ?
W5 O30 P2 O31 33.0(6) . . . . ?
W5 O30 P2 C9 143.8(5) . . . . ?
W6 O31 P2 O36 92.6(5) . . . . ?
W6 O31 P2 O30 -36.5(6) . . . . ?
W6 O31 P2 C9 -145.0(5) . . . . ?
C11 C9 P2 O36 14.4(9) . . . . ?
C10 C9 P2 O36 -166.3(9) . . . . ?
C11 C9 P2 O30 139.2(8) . . . . ?
C10 C9 P2 O30 -41.5(10) . . . . ?
C11 C9 P2 O31 -109.5(8) . . . . ?
C10 C9 P2 O31 69.8(10) . . . . ?
NA1 O37 P3 O33 111(3) . . . . ?
NA1 O37 P3 O32 -125(3) . . . . ?
NA1 O37 P3 C17 -7(3) . . . . ?
W8 O33 P3 O37 93.9(6) . . . . ?
W8 O33 P3 O32 -33.6(6) . . . . ?
W8 O33 P3 C17 -144.1(5) . . . . ?
W7 O32 P3 O37 -93.4(5) . . . . ?
```

```
W7 O32 P3 O33 35.7(5) . . . . ?
W7 O32 P3 C17 145.1(5) . . . . ?
C18 C17 P3 O37 169.9(9) . . . . ?
C19 C17 P3 O37 -8.2(9) . . . . ?
C18 C17 P3 O33 44.5(10) . . . . ?
C19 C17 P3 O33 -133.5(8) . . . . ?
C18 C17 P3 O32 -67.1(9) . . . . ?
C19 C17 P3 O32 114.9(8) . . . . ?
W4 O8 W1 O1 -137.9(7) . . . . ?
W4 O8 W1 O6 122.2(7) . . . . ?
W4 O8 W1 O2 33.7(12) . . . . ?
W4 O8 W1 O9 -36.9(7) . . . . ?
W4 O8 W1 O7 49.2(7) . . . . ?
W3 O6 W1 O1 172.0(4) . . . . ?
W3 O6 W1 O8 -87.2(4) . . . . ?
W3 O6 W1 O2 71.3(4) . . . . ?
W3 O6 W1 O9 -13.2(10) . . . . ?
W3 O6 W1 O7 -0.7(3) . . . . ?
W2 O2 W1 O1 -170.7(4) . . . . ?
W2 O2 W1 O8 17.6(9) . . . . ?
W2 O2 W1 O6 -71.1(4) . . . . ?
W2 O2 W1 O9 87.4(4) . . . . ?
W2 O2 W1 O7 1.4(3) . . . . ?
W5 O9 W1 O1 137.7(7) . . . . ?
W5 O9 W1 O8 38.3(7) . . . . ?
W5 O9 W1 O6 -37.0(13) . . . . ?
W5 O9 W1 O2 -121.6(8) . . . . ?
W5 O9 W1 O7 -49.0(7) . . . . ?
Si1 O7 W1 O1 -178.0(15) . . . . ?
W2 O7 W1 O1 48.5(17) . . . . ?
W3 O7 W1 O1 -44.6(17) . . . . ?
Si1 O7 W1 O8 -41.6(4) . . . . ?
W2 O7 W1 O8 -175.1(2) . . . . ?
W3 O7 W1 O8 91.9(2) . . . . ?
Si1 O7 W1 O6 -133.0(4) . . . . ?
W2 O7 W1 O6 93.5(2) . . . . ?
W3 O7 W1 O6 0.5(2) . . . . ?
Si1 O7 W1 O2 132.5(4) . . . . ?
W2 O7 W1 O2 -1.0(2) . . . . ?
W3 O7 W1 O2 -94.0(2) . . . . ?
Si1 O7 W1 O9 42.4(4) . . . . ?
W2 O7 W1 O9 -91.1(2) . . . . ?
W3 O7 W1 O9 175.9(2) . . . . ?
W1 O2 W2 O3 170.9(4) . . . . ?
W1 O2 W2 O10 -87.3(4) . . . . ?
W1 O2 W2 O4 71.2(4) . . . . ?
W1 O2 W2 O11 -14.9(9) . . . . ?
W1 O2 W2 O7 -1.4(3) . . . . ?
W6 O10 W2 O3 -138.3(8) . . . . ?
W6 O10 W2 O2 122.0(8) . . . . ?
W6 O10 W2 O4 31.6(13) . . . . ?
W6 O10 W2 O11 -38.2(8) . . . . ?
W6 O10 W2 O7 48.8(8) . . . . ?
W3 O4 W2 O3 -170.1(4) . . . . ?
W3 O4 W2 O2 -70.8(4) . . . . ?
W3 O4 W2 O10 19.9(10) . . . . ?
W3 O4 W2 O11 88.6(4) . . . . ?
W3 O4 W2 O7 1.9(3) . . . . ?
W7 O11 W2 O3 138.6(7) . . . . ?
W7 O11 W2 O2 -35.5(12) . . . . ?
W7 O11 W2 O10 38.2(7) . . . . ?
W7 O11 W2 O4 -121.6(7) . . . . ?
W7 O11 W2 O7 -48.5(7) . . . . ?
Si1 O7 W2 O3 -179(42) . . . . ?
W1 O7 W2 O3 -45.3(15) . . . . ?
W3 O7 W2 O3 46.9(16) . . . . ?
```

```
Si1 O7 W2 O2 -132.9(4) . . . . ?
W1 O7 W2 O2 1.0(2) . . . . ?
W3 O7 W2 O2 93.2(2) . . . . ?
Si1 O7 W2 O10 -40.9(4) . . . . ?
W1 O7 W2 O10 93.0(2) . . . . ?
W3 O7 W2 O10 -174.8(2) . . . . ?
Si1 O7 W2 O4 132.6(4) . . . . ?
W1 O7 W2 O4 -93.5(2) . . . . ?
W3 O7 W2 O4 -1.4(2) . . . . ?
Si1 O7 W2 O11 42.4(4) . . . . ?
W1 O7 W2 O11 176.3(2) . . . . ?
W3 O7 W2 O11 -91.6(2) . . . . ?
W1 O6 W3 O5 -170.7(4) . . . . ?
W1 O6 W3 O4 -71.5(4) . . . . ?
W1 O6 W3 O13 87.1(4) . . . . ?
W1 O6 W3 O12 14.8(10) . . . . ?
W1 O6 W3 O7 0.7(3) . . . . ?
W2 O4 W3 O5 170.2(4) . . . . ?
W2 O4 W3 O6 70.6(4) . . . . ?
W2 O4 W3 O13 -17.0(10) . . . . ?
W2 O4 W3 O12 -88.2(4) . . . . ?
W2 O4 W3 O7 -1.9(3) . . . . ?
W9 O13 W3 O5 139.9(7) . . . . ?
W9 O13 W3 O6 -120.4(7) . . . . ?
W9 O13 W3 O4 -32.9(13) . . . . ?
W9 O13 W3 O12 39.3(7) . . . . ?
W9 O13 W3 O7 -47.2(7) . . . . ?
W8 O12 W3 O5 -138.5(7) . . . . ?
W8 O12 W3 O6 35.9(13) . . . . ?
W8 O12 W3 O4 122.2(7) . . . . ?
W8 O12 W3 O13 -37.4(7) . . . . ?
W8 O12 W3 O7 49.5(7) . . . . ?
Si1 O7 W3 O5 -176.8(14) . . . . ?
W2 O7 W3 O5 -43.2(16) . . . . ?
W1 O7 W3 O5 49.8(16) . . . . ?
Si1 O7 W3 O6 133.0(4) . . . . ?
W2 O7 W3 O6 -93.4(3) . . . . ?
W1 O7 W3 O6 -0.5(2) . . . . ?
Si1 O7 W3 O4 -132.2(4) . . . . ?
W2 O7 W3 O4 1.4(2) . . . . ?
W1 O7 W3 O4 94.4(3) . . . . ?
Si1 O7 W3 O13 42.3(4) . . . . ?
W2 O7 W3 O13 175.9(3) . . . . ?
W1 O7 W3 O13 -91.1(2) . . . . ?
Si1 O7 W3 O12 -41.9(4) . . . . ?
W2 O7 W3 O12 91.7(2) . . . . ?
W1 O7 W3 O12 -175.4(2) . . . . ?
W5 O18 W4 O17 -123.7(7) . . . . ?
W5 O18 W4 O8 -23.7(7) . . . . ?
W5 O18 W4 O28 60.6(11) . . . . ?
W5 O18 W4 O29 140.2(7) . . . . ?
W5 O18 W4 O14 61.2(7) . . . . ?
W1 O8 W4 O17 134.1(7) . . . . ?
W1 O8 W4 O18 34.2(7) . . . . ?
W1 O8 W4 O28 -125.1(7) . . . . ?
W1 O8 W4 O29 -48.6(13) . . . . ?
W1 O8 W4 O14 -50.6(7) . . . . ?
W9 O28 W4 O17 -171.0(3) . . . . ?
W9 O28 W4 O18 4.7(9) . . . . ?
W9 O28 W4 O8 88.6(3) . . . . ?
W9 O28 W4 O29 -75.5(3) . . . . ?
W9 O28 W4 O14 4.2(3) . . . . ?
P1 O29 W4 O17 152.0(5) . . . . ?
P1 O29 W4 O18 -107.8(5) . . . . ?
P1 O29 W4 O8 -25.3(12) . . . . ?
P1 O29 W4 O28 51.7(5) . . . . ?
```

```
P1 O29 W4 O14 -23.3(5) . . . . ?
Si1 O14 W4 O17 -173(2) . . . . ?
W9 O14 W4 O17 42(2) . . . . ?
Si1 O14 W4 O18 -38.1(4) . . . . ?
W9 O14 W4 O18 176.9(2) . . . . ?
Si1 O14 W4 O8 50.2(4) . . . . ?
W9 O14 W4 O8 -94.8(2) . . . . ?
Si1 O14 W4 O28 141.7(4) . . . . ?
W9 O14 W4 O28 -3.2(2) . . . . ?
Si1 O14 W4 O29 -129.3(4) . . . . ?
W9 O14 W4 O29 85.8(2) . . . . ?
W1 O9 W5 O19 -136.0(7) . . . . ?
W1 O9 W5 O18 -35.2(7) . . . . ?
W1 O9 W5 O20 123.7(7) . . . . ?
W1 O9 W5 O30 38.1(14) . . . . ?
W1 O9 W5 O15 49.8(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O19 124.6(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O9 23.6(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O20 -63.8(10) . . . . ?
W4 O18 W5 O30 -140.3(7) . . . . ?
W4 O18 W5 O15 -61.7(7) . . . . ?
W6 O20 W5 O19 168.7(3) . . . . ?
W6 O20 W5 O9 -89.4(3) . . . . ?
W6 O20 W5 O18 -3.0(9) . . . . ?
W6 O20 W5 O30 73.7(3) . . . . ?
W6 O20 W5 O15 -5.2(3) . . . . ?
P2 O30 W5 O19 -147.7(5) . . . . ?
P2 O30 W5 O9 38.1(12) . . . . ?
P2 O30 W5 O18 111.3(5) . . . . ?
P2 O30 W5 O20 -48.2(5) . . . . ?
P2 O30 W5 O15 26.2(5) . . . . ?
Si1 O15 W5 O19 173.3(17) . . . . ?
W6 O15 W5 O19 -41(2) . . . . ?
Si1 O15 W5 O9 -48.3(4) . . . . ?
W6 O15 W5 O9 97.3(2) . . . . ?
Si1 O15 W5 O18 39.1(4) . . . . ?
W6 O15 W5 O18 -175.2(2) . . . . ?
Si1 O15 W5 O20 -141.7(5) . . . . ?
W6 O15 W5 O20 4.0(2) . . . . ?
Si1 O15 W5 O30 128.2(4) . . . . ?
W6 O15 W5 O30 -86.1(2) . . . . ?
W2 O10 W6 O21 134.9(8) . . . . ?
W2 O10 W6 O22 34.4(8) . . . . ?
W2 O10 W6 O20 -125.0(8) . . . . ?
W2 O10 W6 O31 -50.9(14) . . . . ?
W2 O10 W6 O15 -50.1(8) . . . . ?
W7 O22 W6 O21 -119.8(6) . . . . ?
W7 O22 W6 O10 -19.9(6) . . . . ?
W7 O22 W6 O20 63.1(10) . . . . ?
W7 O22 W6 O31 144.2(6) . . . . ?
W7 O22 W6 O15 63.8(6) . . . . ?
W5 O20 W6 O21 -171.2(3) . . . . ?
W5 O20 W6 O10 88.6(3) . . . . ?
W5 O20 W6 O22 5.9(9) . . . . ?
W5 O20 W6 O31 -76.0(3) . . . . ?
W5 O20 W6 O15 5.2(3) . . . . ?
P2 O31 W6 O21 153.9(5) . . . . ?
P2 O31 W6 O10 -20.4(13) . . . . ?
P2 O31 W6 O22 -105.3(5) . . . . ?
P2 O31 W6 O20 54.1(5) . . . . ?
P2 O31 W6 O15 -21.2(5) . . . . ?
Si1 O15 W6 O21 176(2) . . . . ?
W5 O15 W6 O21 31(3) . . . . ?
Si1 O15 W6 O10 50.0(4) . . . . ?
W5 O15 W6 O10 -95.2(2) . . . . ?
Si1 O15 W6 O22 -38.6(4) . . . . ?
```

```
W5 O15 W6 O22 176.3(2) . . . . ?
Si1 O15 W6 O20 141.2(5) . . . . ?
W5 O15 W6 O20 -4.0(2) . . . . ?
Si1 O15 W6 O31 -130.3(4) . . . . ?
W5 O15 W6 O31 84.6(2) . . . . ?
W2 O11 W7 O23 -134.8(7) . . . . ?
W2 O11 W7 O22 -35.1(7) . . . . ?
W2 O11 W7 O24 125.0(7) . . . . ?
W2 O11 W7 O32 49.3(14) . . . . ?
W2 O11 W7 O16 49.3(7) . . . . ?
W6 O22 W7 O23 120.6(6) . . . . ?
W6 O22 W7 O11 20.6(6) . . . . ?
W6 O22 W7 O24 -68.9(10) . . . . ?
W6 O22 W7 O32 -144.2(6) . . . . ?
W6 O22 W7 O16 -64.4(6) . . . . ?
W8 O24 W7 O23 171.0(3) . . . . ?
W8 O24 W7 O11 -88.8(3) . . . . ?
W8 O24 W7 O22 0.5(9) . . . . ?
W8 O24 W7 O32 76.4(3) . . . . ?
W8 O24 W7 O16 -4.1(3) . . . . ?
P3 O32 W7 O23 -153.7(5) . . . . ?
P3 O32 W7 O11 22.4(12) . . . . ?
P3 O32 W7 O22 106.7(5) . . . . ?
P3 O32 W7 O24 -54.1(5) . . . . ?
P3 O32 W7 O16 22.3(4) . . . . ?
Si1 O16 W7 O23 169(2) . . . . ?
W8 O16 W7 O23 -46(2) . . . . ?
Si1 O16 W7 O11 -49.7(4) . . . . ?
W8 O16 W7 O11 95.3(2) . . . . ?
Si1 O16 W7 O22 39.8(4) . . . . ?
W8 O16 W7 O22 -175.2(2) . . . . ?
Si1 O16 W7 O24 -141.7(4) . . . . ?
W8 O16 W7 O24 3.2(2) . . . . ?
Si1 O16 W7 O32 130.3(4) . . . . ?
W8 O16 W7 O32 -84.7(2) . . . . ?
W3 O12 W8 O25 134.6(7) . . . . ?
W3 O12 W8 O26 34.0(7) . . . . ?
W3 O12 W8 O24 -126.0(7) . . . . ?
W3 O12 W8 O33 -45.6(14) . . . . ?
W3 O12 W8 O16 -51.0(7) . . . . ?
W9 O26 W8 O25 -123.8(6) . . . . ?
W9 O26 W8 O12 -23.5(6) . . . . ?
W9 O26 W8 O24 64.4(10) . . . . ?
W9 O26 W8 O33 140.4(6) . . . . ?
W9 O26 W8 O16 61.6(6) . . . . ?
W7 O24 W8 O25 -170.5(3) . . . . ?
W7 O24 W8 O12 88.7(3) . . . . ?
W7 O24 W8 O26 1.2(9) . . . . ?
W7 O24 W8 O33 -75.2(3) . . . . ?
W7 O24 W8 O16 4.1(3) . . . . ?
P3 O33 W8 O25 149.4(5) . . . . ?
P3 O33 W8 O12 -30.4(13) . . . . ?
P3 O33 W8 O26 -109.9(5) . . . . ?
P3 O33 W8 O24 50.6(5) . . . . ?
P3 O33 W8 O16 -24.9(5) . . . . ?
Si1 O16 W8 O25 -175.4(19) . . . . ?
W7 O16 W8 O25 39(2) . . . . ?
Si1 O16 W8 O12 49.9(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O12 -95.5(2) . . . . ?
Si1 O16 W8 O26 -38.8(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O26 175.8(2) . . . . ?
Si1 O16 W8 O24 142.2(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O24 -3.3(2) . . . . ?
Si1 O16 W8 O33 -128.5(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O33 86.0(2) . . . . ?
W8 O26 W9 O27 124.3(6) . . . . ?
```

```
W8 O26 W9 O13 24.4(6) . . . . ?
W8 O26 W9 O28 -63.3(10) . . . . ?
W8 O26 W9 O34 -140.7(6) . . . . ?
W8 O26 W9 O14 -61.6(6) . . . . ?
W3 O13 W9 O27 -136.3(7) . . . . ?
W3 O13 W9 O26 -36.8(7) . . . . ?
W3 O13 W9 O28 124.0(7) . . . . ?
W3 O13 W9 O34 42.2(15) . . . . ?
W3 O13 W9 O14 48.9(7) . . . . ?
W4 O28 W9 O27 170.0(3) . . . . ?
W4 O28 W9 O26 -2.5(9) . . . . ?
W4 O28 W9 O13 -89.6(3) . . . . ?
W4 O28 W9 O34 75.3(3) . . . . ?
W4 O28 W9 O14 -4.2(3) . . . . ?
P1 O34 W9 O27 -150.3(5) . . . . ?
P1 O34 W9 O26 110.1(5) . . . . ?
P1 O34 W9 O13 31.1(13) . . . . ?
P1 O34 W9 O28 -51.2(5) . . . . ?
P1 O34 W9 O14 24.4(5) . . . . ?
Si1 O14 W9 O27 170.7(18) . . . . ?
W4 O14 W9 O27 -44(2) . . . . ?
Si1 O14 W9 O26 38.3(4) . . . . ?
W4 O14 W9 O26 -176.2(2) . . . . ?
Si1 O14 W9 O13 -50.0(4) . . . . ?
W4 O14 W9 O13 95.5(2) . . . . ?
Si1 O14 W9 O28 -142.3(4) . . . . ?
W4 O14 W9 O28 3.3(2) . . . . ?
Si1 O14 W9 O34 128.2(4) . . . . ?
W4 O14 W9 O34 -86.2(2) . . . . ?
P2 O36 NA1 O36 -95(4) . . . 2_766 ?
P2 O36 NA1 O37 34(3) . . . 2_766 ?
P2 O36 NA1 O37 -146(3) . . . . ?
P2 O36 NA1 O35 124(3) . . . . ?
P2 O36 NA1 O35 -56(3) . . . 2_766 ?
P3 O37 NA1 O36 145(3) . . . . ?
P3 O37 NA1 O36 -35(3) . . . 2_766 ?
P3 O37 NA1 O37 174(4) . . . 2_766 ?
P3 O37 NA1 O35 -127(3) . . . . ?
P3 O37 NA1 O35 53(3) . . . 2_766 ?
P1 O35 NA1 O36 -145(3) . . . . ?
P1 O35 NA1 O36 35(3) . . . 2_766 ?
P1 O35 NA1 O37 -55(3) . . . 2_766 ?
P1 O35 NA1 O37 125(3) . . . . ?
P1 O35 NA1 O35 -162(3) . . . 2_766 ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.879
_diffrn_reflns_theta_full              65.89
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.879
_refine_diff_density_max    1.981
_refine_diff_density_min   -1.358
_refine_diff_density_rms    0.188
```